



POLITÉCNICA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES  
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid  
Tel.: 91 336 3060  
info.industriales@upm.es

[www.industriales.upm.es](http://www.industriales.upm.es)



Laura Rey García

05 PROYECTO FIN DE CARRERA

INDUSTRIALES

PROYECTO FIN DE CARRERA

# MODELIZACIÓN DE LA GASIFICACIÓN DE LODOS DE DEPURADORAS URBANAS

ABRIL 2016

**Laura Rey García**

DIRECTORES DEL PROYECTO:  
**M<sup>a</sup> Encarnación Rodríguez Hurtado**  
**Juan Manuel de Andrés Almeida**





UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE  
MADRID

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE  
INGENIEROS INDUSTRIALES



PROYECTO FIN DE CARRERA

# MODELIZACIÓN DE LA GASIFICACIÓN DE LODOS DE DEPURADORAS URBANAS

**Autor:** Laura Rey García

**Tutores:** Dña. M<sup>a</sup> Encarnación Rodríguez Hurtado  
D. Juan Manuel de Andrés Almeida

Madrid, abril 2016

*A mis padres*

## **AGRADECIMIENTOS**

Este Proyecto Fin de Carrera es el resultado de gran esfuerzo y trabajo, que no hubiese sido posible sin el apoyo de muchas personas.

En primer lugar, quiero agradecer la ayuda de mis tutores Dña. M<sup>a</sup> Encarnación Rodríguez Hurtado y D. Juan Manuel de Andrés Almeida. Deseo darles las gracias por los conocimientos que me han transmitido, por su orientación y por sus consejos.

Este proyecto está dedicado a mis padres Roberto y Rosa. Muchas gracias por vuestra paciencia, por vuestro cariño, por la educación que me habéis brindado y por vuestro apoyo incondicional en los buenos y, sobre todo, en los malos momentos.

Extiendo mi gratitud a mis compañeros y amigos de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales por compartir conmigo tantas horas de estudio, en especial a Rafa, Dani, Álex, Paula, Davinia y Deylis.

Por último, quiero dar las gracias a Carlos por dedicarme todo su tiempo y por estar siempre a mi lado.

## **RESUMEN**

La gasificación de lodos de depuración consiste en la conversión termoquímica del lodo por oxidación parcial a alta temperatura mediante un agente gasificante, que generalmente es aire, oxígeno o vapor de agua. Se trata de una tecnología de gran interés, ya que consigue reducir la masa de estos residuos y permite el aprovechamiento de los gases formados, tanto en la generación de energía térmica y/o eléctrica como en la síntesis de productos químicos orgánicos y combustibles líquidos.

Debido a la complejidad de este proceso, es útil el uso de modelos que faciliten su estudio de forma fiable y a bajo coste. El presente Proyecto Fin de Carrera se centra en el diseño de un modelo adimensional de equilibrio en estado estacionario basado en la minimización de la energía libre de Gibbs. Para ello, se ha empleado el *software* de simulación de procesos Aspen Plus, que posee una amplia base de datos de propiedades físicas y permite gran flexibilidad en el manejo de sólidos.

Para la elaboración del modelo se han asumido las hipótesis de mezcla perfecta dentro del reactor y operación isoterma. El gasificador se ha considerado de lecho fluidizado burbujeante, al permitir un buen control de la temperatura y una alta transferencia de materia y energía entre el sólido y el agente gasificante.

El modelo desarrollado consta de cuatro etapas. La primera reproduce el proceso de pirólisis o descomposición térmica de los componentes del lodo en ausencia de agente gasificante. En la segunda etapa se simula que todo el nitrógeno y el azufre contenidos en el lodo se transforman en amoníaco y ácido sulfhídrico, respectivamente. En la tercera etapa se produce la gasificación en dos reactores. El primer gasificador alcanza el equilibrio químico mediante la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema. En el segundo reactor se establece un equilibrio restringido por medio de la especificación de una aproximación de temperatura para cada reacción. Este método permite validar los resultados del modelo con datos reales. En la última etapa se separa el residuo carbonoso o *char* (compuesto por carbono y cenizas) del gas de salida, formado por  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$  (supuesto como único hidrocarburo presente),  $NH_3$ ,  $H_2S$  y  $H_2O$ . Este gas debe ser depurado mediante equipos de limpieza aguas abajo.

Los resultados de la simulación del modelo han sido validados frente a los valores obtenidos en ensayos previos llevados a cabo en la planta de gasificación a escala de laboratorio ubicada en el Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid. Estos resultados han mostrado muy buena concordancia con los obtenidos experimentalmente, con un error inferior al 7% en todos los parámetros analizados en el caso de gasificación con aire y menor al 13% cuando se utiliza una mezcla aire/vapor de agua como agente gasificante.

Se ha realizado un análisis de sensibilidad con el fin de estudiar la influencia de las condiciones de operación (temperatura, *ratio* equivalente y *ratio* vapor/biomasa) sobre los resultados del proceso modelado (composición, producción y poder calorífico inferior de los gases, conversión de carbono y eficiencia de la gasificación). Para ello, se han llevado a cabo diferentes simulaciones modificando la temperatura de gasificación entre 750°C y 850°C, el *ratio* equivalente (ER) entre 0,2 y 0,4 y el *ratio* vapor/biomasa (S/B) entre 0 y 1. Como ya ocurriera con la validación del modelo, los resultados de las simulaciones bajo las distintas condiciones de gasificación se ajustan de forma satisfactoria a los valores experimentales.

Se ha encontrado que un aumento en la temperatura mejora la cantidad y la calidad del gas producido y, por tanto, la eficiencia del proceso. Un incremento del *ratio* equivalente reduce la concentración de CO y H<sub>2</sub> en el gas y, en consecuencia, también su poder calorífico. Sin embargo, valores bajos del *ratio* equivalente disminuyen la producción de gases y la conversión de carbono. La alimentación de vapor de agua en el sistema mejora todos los parámetros analizados. Por tanto, dentro del rango estudiado, las condiciones de operación que optimizan el proceso de gasificación de lodos consisten en el empleo de mezclas aire/vapor de agua como agente gasificante, una temperatura de 850°C y un ER de 0,3.

**Palabras clave:** gasificación de lodos, modelo de simulación, Aspen Plus, agente gasificante, *ratio* equivalente, *ratio* vapor/biomasa, análisis de sensibilidad.

## ÍNDICE GENERAL

RESUMEN .....	i
ÍNDICE GENERAL.....	iii
ÍNDICE DE FIGURAS .....	v
ÍNDICE DE TABLAS .....	ix
1. OBJETIVOS .....	1
1.1. Estructura del proyecto .....	1
2. INTRODUCCIÓN .....	3
2.1. Antecedentes.....	3
2.1.1. Problemática energética y de los residuos.....	3
2.1.2. Lodos de depuración.....	3
2.1.3. Proceso de gasificación .....	6
2.1.4. Modelos de gasificación .....	9
2.2. Motivación.....	14
3. METODOLOGÍA .....	16
3.1. Ensayos de laboratorio previos.....	16
3.1.1. Caracterización de lodos.....	16
3.1.2. Planta a escala de laboratorio .....	17
3.1.3. Ensayos de gasificación en continuo .....	19
3.2. Modelo de simulación con Aspen Plus.....	23
3.2.1. Justificación .....	23
3.2.2. Hipótesis .....	23
3.2.3. Datos de partida.....	24
3.2.4. Descripción del modelo .....	25
3.2.5. Diseño del modelo de simulación.....	30
3.2.6. Determinación de las aproximaciones de temperatura .....	57
3.2.7. Modelo con inyección de vapor .....	60
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	63
4.1. Validación del modelo.....	63
4.2. Análisis de sensibilidad .....	65
4.2.1. Influencia de la temperatura .....	65
4.2.2. Influencia del <i>ratio</i> equivalente.....	70
4.2.3. Influencia del <i>ratio</i> vapor/biomasa.....	73
4.2.4. Influencia de la temperatura con inyección de vapor .....	76
4.3. Condiciones de operación óptimas .....	81
4.4. Consideraciones en el ámbito legal, ético, medioambiental y socioeconómico.....	82
5. CONCLUSIONES .....	85
6. LÍNEAS FUTURAS .....	87

## ÍNDICE GENERAL

---

7. PLANIFICACIÓN .....	88
7.1. Actividades .....	88
7.2. Digrama de Gantt.....	88
8. PRESUPUESTO .....	90
ABREVIATURAS Y ACRÓNIMOS .....	91
BIBLIOGRAFÍA.....	92



## **ÍNDICE DE FIGURAS**

Figura 2.1. Generación de lodos de EDAR .....	4
Figura 2.2. Tipos de gasificadores.....	8
Figura 3.1. Muestras de lodo seco empleadas en los ensayos .....	16
Figura 3.2. Planta de gasificación a escala de laboratorio.....	19
Figura 3.3. Esquema de la planta de gasificación a escala de laboratorio.....	19
Figura 3.4. Procedimiento de cálculo con Aspen Plus .....	26
Figura 3.5. Diagrama de flujo del modelo de simulación con Aspen Plus .....	27
Figura 3.6. Plantillas de simulación instaladas.....	31
Figura 3.7. Características globales.....	31
Figura 3.8. Tipos de corrientes .....	32
Figura 3.9. Componentes.....	33
Figura 3.10. Método de propiedades físicas.....	34
Figura 3.11. Ecuación y parámetros del método de propiedades PR-BM.....	34
Figura 3.12. Correlaciones del modelo de densidad DCOALIGT .....	35
Figura 3.13. Correlaciones y códigos de opciones del modelo de entalpía HCOALGEN.....	36
Figura 3.14. Modelo de propiedades del lodo .....	37
Figura 3.15. Definición de HCOMB como PCI del lodo .....	37
Figura 3.16. Poder calorífico del lodo .....	38
Figura 3.17. Modelo de propiedades de la ceniza .....	38
Figura 3.18. Continuación del modelo en el entorno de simulación .....	38
Figura 3.19. Especificación de la corriente de alimentación LODOS .....	39
Figura 3.20. Análisis proximal del lodo .....	39
Figura 3.21. Análisis elemental del lodo .....	40
Figura 3.22. Análisis sulfanal del lodo .....	40

Figura 3.23. Condiciones de operación del bloque DESCOMP .....	41
Figura 3.24. Distribución de rendimientos en DESCOMP .....	41
Figura 3.25. Análisis proximal de la ceniza .....	42
Figura 3.26. Análisis elemental de la ceniza .....	42
Figura 3.27. Análisis sulfanal de la ceniza .....	42
Figura 3.28. Fracción de carbono fijo en la subcorriente MIXED de CFIJO .....	43
Figura 3.29. Fracción de carbono fijo en la subcorriente CISOLID de CFIJO .....	43
Figura 3.30. Fracción de carbono fijo en la subcorriente NC de CFIJO .....	43
Figura 3.31. Condiciones de operación del bloque RNOEQ .....	44
Figura 3.32. Reacción de conversión del nitrógeno en RNOEQ .....	44
Figura 3.33. Reacción de conversión del azufre en RNOEQ .....	45
Figura 3.34. Estequiometría de las reacciones en RNOEQ .....	45
Figura 3.35. Fracciones de separación de $\text{NH}_3$ y $\text{H}_2\text{S}$ en la subcorriente MIXED de NOEQ .....	46
Figura 3.36. Condiciones de operación del bloque CAL1 .....	46
Figura 3.37. Especificación corriente de entrada de aire .....	47
Figura 3.38. Condiciones de operación del bloque GASIF1 .....	48
Figura 3.39. Productos del proceso de gasificación en GASIF1 .....	48
Figura 3.40. Nitrógeno inerte del aire en GASIF1 .....	49
Figura 3.41. Fracción de separación de la ceniza .....	49
Figura 3.42. Condiciones de operación de GASIF2 .....	50
Figura 3.43. Productos del proceso de gasificación en GASIF2 .....	50
Figura 3.44. Nitrógeno inerte del aire en GASIF2 .....	51
Figura 3.45. Reacciones químicas en GASIF2 .....	51
Figura 3.46. Reacción de combustión incompleta en GASIF2 .....	52
Figura 3.47. Reacción <i>water-gas</i> en GASIF2 .....	52

Figura 3.48. Reacción de Boudouard en GASIF2 .....	53
Figura 3.49. Reacción de metanización en GASIF2 .....	53
Figura 3.50. Opciones del mezclador MIX1 .....	54
Figura 3.51. Fracciones de separación de los componentes gaseosos en la subcorriente MIXED de GASES .....	54
Figura 3.52. Opciones del mezclador MIX2 .....	55
Figura 3.53. Simulación del proceso de gasificación de lodos .....	56
Figura 3.54. Conjunto de valores DS-1 de tipo Point-Data.....	57
Figura 3.55. Especificación del tipo de variable de los datos experimentales .....	58
Figura 3.56. Valores y desviación estándar de los datos de composición de los gases.....	58
Figura 3.57. Regresión DR-1 .....	59
Figura 3.58. Conjunto de datos seleccionados DS-1 para la regresión DR-1 .....	59
Figura 3.59. Tipo de variable manipulada y rango de $\Delta T$ .....	59
Figura 3.60. Diagrama de flujo del modelo de simulación del proceso con inyección de vapor.....	61
Figura 3.61. Especificación de la corriente de vapor de agua .....	62
Figura 4.1. Evolución de la composición de los gases con la temperatura .....	67
Figura 4.2. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura.....	69
Figura 4.3. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura.....	70
Figura 4.4. Evolución de la composición de los gases con el <i>ratio</i> equivalente .....	71
Figura 4.5. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con el <i>ratio</i> equivalente .....	72
Figura 4.6. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con el <i>ratio</i> equivalente .....	73
Figura 4.7. Evolución de la composición de los gases con el <i>ratio</i> vapor/biomasa .....	74

## ÍNDICE DE FIGURAS

---

Figura 4.8.	Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con el <i>ratio</i> vapor/biomasa .....	75
Figura 4.9.	Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con el <i>ratio</i> vapor/biomasa .....	76
Figura 4.10.	Evolución de la composición de los gases con la temperatura y $S/B = 0,5$ .....	77
Figura 4.11.	Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura y $S/B = 0,5$ .....	78
Figura 4.12.	Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura y $S/B = 0,5$ .....	79
Figura 4.13.	Evolución de la composición de los gases con la temperatura para distintos valores de $S/B$ .....	80
Figura 4.14.	Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura para distintos valores de $S/B$ .....	80
Figura 4.15.	Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura para distintos valores de $S/B$ .....	81
Figura 7.1.	Diagrama de Gantt del proyecto .....	89

## **ÍNDICE DE TABLAS**

Tabla 3.1.	Resultados de los ensayos de caracterización de lodos .....	17
Tabla 3.2.	Composición másica de los lodos en base húmeda.....	17
Tabla 3.3.	Condiciones de operación de los ensayos de gasificación .....	20
Tabla 3.4.	Valores de PCI de los gases combustibles .....	21
Tabla 3.5.	Resultados de los ensayos de gasificación.....	22
Tabla 3.6.	Unidades de las variables del sistema MET.....	32
Tabla 3.7.	Aproximaciones de temperatura de las reacciones en GASIF2 .....	60
Tabla 3.8.	Aproximaciones de temperatura de las reacciones en GASIF2 en el modelo con inyección de vapor .....	62
Tabla 4.1.	Error relativo del modelo de Aspen Plus .....	63
Tabla 4.2.	Error relativo del modelo de Aspen Plus con inyección de vapor .....	64
Tabla 4.3.	Resultados del modelo de Aspen Plus .....	66
Tabla 4.4.	Composición del gas para distintas temperaturas en el modelo de simulación (con ER = 0,3 y S/B = 0).....	67
Tabla 4.5.	Producción de gases y conversión de carbono para distintas temperaturas en el modelo de simulación (ER = 0,3 y S/B = 0) .....	68
Tabla 4.6.	Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintas temperaturas en el modelo de simulación (ER = 0,3 y S/B = 0).....	69
Tabla 4.7.	Composición del gas para distintos valores de ER en el modelo de simulación (con T = 800°C y S/B = 0) .....	71
Tabla 4.8.	Producción de gases y conversión de carbono para distintos valores de ER en el modelo de simulación (T = 800°C y S/B = 0).....	72
Tabla 4.9.	Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintos valores de ER en el modelo de simulación (T = 800°C y S/B = 0).....	73
Tabla 4.10.	Composición del gas para distintos valores de S/B en el modelo de simulación (con T = 800°C y ER = 0,3) .....	74
Tabla 4.11.	Producción de gases y conversión de carbono para distintos valores de S/B en el modelo de simulación (T = 800°C y ER = 0,3).....	75

## ÍNDICE DE TABLAS

---

Tabla 4.12.	Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintos valores de S/B en el modelo de simulación ( $T = 800^{\circ}\text{C}$ y $ER = 0,3$ ).....	76
Tabla 4.13.	Composición del gas para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación ( $ER = 0,3$ y $S/B = 0,5$ ) .....	77
Tabla 4.14.	Producción de gases y conversión de carbono para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación ( $ER = 0,3$ y $S/B = 0,5$ ) .....	78
Tabla 4.15.	Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación (con $ER = 0,3$ y $S/B = 0,5$ ) .....	78
Tabla 7.1.	Principales actividades desarrolladas durante la realización del proyecto .....	88
Tabla 8.1.	Presupuesto del Proyecto Fin de Carrera .....	90

### **1. OBJETIVOS**

El principal propósito de este Proyecto Fin de Carrera consiste en el diseño de un modelo del proceso de gasificación de lodos de depuradoras urbanas en un reactor de lecho fluidizado burbujeante, empleando el *software* de simulación Aspen Plus.

Además del desarrollo del modelo de simulación, el trabajo realizado ha logrado la consecución de los siguientes objetivos parciales:

- Revisión bibliográfica de conceptos fundamentales relacionados con las tecnologías de conversión termoquímica de la biomasa, especialmente de la gasificación de los lodos de depuración.
- Revisión de estudios e investigaciones publicados en la literatura sobre modelos matemáticos y computacionales del proceso de gasificación.
- Simulación del modelo desarrollado con Aspen Plus bajo diferentes condiciones de operación para determinar la eficiencia de la gasificación de los lodos y la composición del gas de síntesis formado.
- Validación del modelo con datos experimentales obtenidos previamente en la planta de gasificación a escala de laboratorio situada en el Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.
- Análisis de sensibilidad para estudiar la influencia de las principales variables de operación en la composición final y en el valor energético del gas de salida.
- Determinación de las condiciones de funcionamiento óptimas que maximizan la producción de gases y la eficiencia del proceso de gasificación de los lodos de depuración.

### **1.1. ESTRUCTURA DEL PROYECTO**

El contenido del proyecto se ha organizado en ocho capítulos o apartados.

Después de describir los objetivos y la estructura del proyecto en este primer capítulo, se desarrolla una breve introducción en el segundo apartado, donde se explica la importancia de la gasificación de los lodos de depuración y se establecen las bases teóricas del proceso. También se incluye una revisión bibliográfica de los distintos modelos (matemáticos y computacionales) publicados sobre esta tecnología.

En el tercer bloque se describen los materiales y equipos de la planta de gasificación a escala de laboratorio que se va a simular y se fijan los datos de partida del modelo. Asimismo, se justifica el tipo de modelo elegido y se establecen las hipótesis en las que se basa. A continuación se detalla el diseño del modelo de simulación con Aspen Plus de la gasificación de lodos. Se incluye un diagrama de flujo en el que los bloques reproducen las distintas etapas del proceso que tienen lugar dentro del equipo de gasificación.

## 1. OBJETIVOS

---

En el capítulo cuarto se validan los resultados del modelo con los obtenidos en los ensayos previos. Posteriormente se exponen los valores de las simulaciones realizadas bajo distintas condiciones de operación. También se efectúa un análisis de sensibilidad para estudiar la influencia de las variables de funcionamiento en la composición del gas de salida y en la eficiencia energética de la gasificación. En este bloque se incluye una valoración de los aspectos medioambientales, socioeconómicos, legales, éticos y profesionales relacionados con el trabajo.

El quinto apartado establece las conclusiones finales a las que se llega tras la realización de todos los análisis anteriores y se determinan las condiciones óptimas de operación para lograr la máxima eficiencia. En el siguiente bloque número seis se proponen algunas líneas de actuación futura para completar este estudio.

El séptimo capítulo aborda la programación y la planificación temporal de las tareas llevadas a cabo en el presente trabajo. Finalmente, el octavo y último apartado expone la evaluación económica y el presupuesto del proyecto, basado en los materiales empleados y en las horas de trabajo dedicadas por el alumno y los tutores.



## **2. INTRODUCCIÓN**

### **2.1. ANTECEDENTES**

#### **2.1.1. Problemática energética y de los residuos**

Buena parte de los problemas ambientales y de sostenibilidad de la vida moderna están relacionados con la generación de energía (Strezov y Evans, 2015). Los sistemas convencionales de conversión de energía utilizan combustibles fósiles y están asociados a emisiones de gases de efecto invernadero y otros contaminantes atmosféricos. Estos impactos ambientales negativos van en aumento debido a la creciente demanda de energía (Abuadala y Dincer, 2011). El agotamiento progresivo de los combustibles fósiles y la creciente preocupación por el calentamiento global y el cambio climático han impulsado la búsqueda de técnicas de generación de energía de origen renovable (Loha et al., 2011).

La Directiva Europea sobre energías renovables (Directiva 2009/28/CE) establece el objetivo de que en 2020 el consumo final de energía de la Unión Europea proceda, al menos, un 20% de fuentes renovables (Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía - IDAE -, 2015). En este contexto, la biomasa se posiciona como una de las más prometedoras alternativas a los combustibles fósiles. La conversión termoquímica de la biomasa tiene una contribución prácticamente nula de gases de efecto invernadero sobre la base de su ciclo completo de vida. La biomasa posee una alta disponibilidad local durante todo el año, lo que garantiza la seguridad de suministro energético (Strezov y Evans, 2015). Una gran parte de la biomasa está constituida por residuos, cuya ventaja principal es su coste bajo, nulo o incluso negativo (Nilsson, 2012).

Además de la creciente demanda energética, otra consecuencia del ritmo de desarrollo de la sociedad actual es el aumento de la generación de residuos, existiendo una gran preocupación para gestionarlos de forma sostenible y económicamente viable (Roche et al., 2012). Uno de los residuos cuya producción se ha incrementado considerablemente es el lodo de depuración, debido al aumento de la población y a la instalación de nuevas depuradoras de aguas residuales (García-Sáinz, 2013).

Este crecimiento notable en la producción de lodos puede llegar a ser un grave problema (Inganzo, 2004). Su correcta gestión de forma económica y sin poner en riesgo la salud pública y el medioambiente se ha convertido en un reto importante en el tratamiento de las aguas residuales (Gil-Lalaguna, 2015). Por ello, es necesario estudiar tecnologías que permitan valorizar estos lodos y minimizar sus impactos ambientales (De Andrés, 2010). Dentro de las alternativas de tratamiento disponibles y, teniendo en cuenta el alto contenido en materia orgánica de estos residuos, la conversión termoquímica y, más concretamente, la gasificación se presenta como una opción interesante para conseguirlo (Gil-Lalaguna, 2015).

#### **2.1.2. Lodos de depuración**

Los lodos de depuración son el principal subproducto generado durante el tratamiento de las aguas residuales domésticas e industriales. Son residuos líquidos o semilíquidos y contienen de 0,25 – 12 % de sólidos. Su composición es variable y depende de la carga de contaminación del agua residual inicial y de los tratamientos utilizados para su depuración (Werther y Ogada, 1999). Los lodos pueden contener ciertos nutrientes de valor agrícola (materia orgánica, nitrógeno, fósforo y potasio), sustancias contaminantes inorgánicas como metales pesados

(cadmio, cromo, cobre, mercurio, níquel, plomo y cinc), contaminantes orgánicos y microorganismos patógenos (Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente - MAGRAMA -, 2015).

Los fangos se generan en las etapas primaria, secundaria y terciaria del tratamiento de las aguas residuales. Así, los lodos primarios, el exceso de fangos activados de la etapa biológica y los procedentes de la etapa terciaria se mezclan y se aplica una serie de tratamientos en la propia estación depuradora para reducir su contenido en agua y en patógenos y asegurar la estabilidad de la materia orgánica (Houdková et al., 2008). La Figura 2.1, muestra un esquema genérico de la producción de lodos en una planta de depuración.

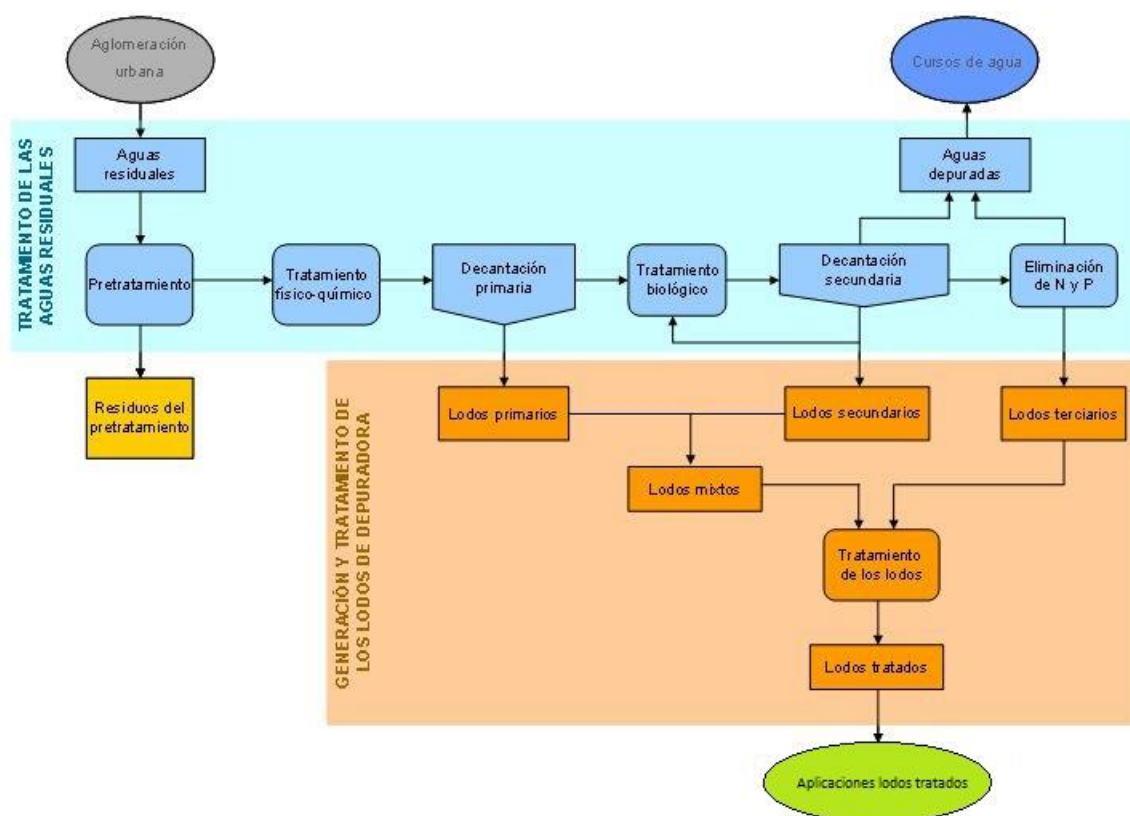


Figura 2.1. Generación de lodos de EDAR. Fuente: Adaptación de MAGRAMA, 2015

Según datos del Registro Nacional de Lodos, en España se producen, anualmente, alrededor de 1.200.000 toneladas (en materia seca) de fangos (MAGRAMA, 2015). Como se ha comentado anteriormente, se prevé que la cantidad generada de estos residuos vaya en aumento.

Las estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) que producen estos lodos deben asegurar su correcta gestión. La manipulación adecuada de estos fangos se debe llevar a cabo conforme a lo establecido en la Ley 22/2011 de residuos y suelos contaminados. La orientación de su manejo debe realizarse respetando los principios de la política de residuos relativos a la protección del medioambiente y la salud humana, aplicándose una jerarquía en las opciones de gestión, priorizando la prevención sobre la reutilización, el reciclado, otros tipos de valorización (incluida la energética) y quedando en último lugar el depósito en vertedero. Las indicaciones sobre su gestión se recogen en el Plan Nacional Integrado de Residuos, PNIR (MAGRAMA, 2015).

La disposición final de los lodos en vertedero es la vía de gestión menos sostenible, debido a que generan lixiviados que contaminan suelos y aguas subterráneas, además de emitir mal olor y gases de efecto invernadero, principalmente metano y CO<sub>2</sub> (Manyà et al., 2006).

En España, según datos del Registro Nacional de Lodos, el principal destino final de los lodos generados (el 80% aproximadamente) es su uso agrícola (MAGRAMA, 2015). Por su alto contenido en materia orgánica y nutrientes, el lodo se emplea como fertilizante y acondicionador del suelo, bien directamente o en forma de compost (Werther y Ogada, 1999). Sin embargo, los fangos presentan en su composición diversas sustancias perjudiciales para la salud y el medioambiente. Por ejemplo, los metales pesados presentes en el lodo (o en el compost producido a partir él) pueden pasar del terreno a los cultivos y de los cultivos a los seres humanos a través de la cadena alimenticia (Fytili y Zabaniotou, 2008).

### - Tratamientos termoquímicos de los lodos de depuradora

La utilización térmica de los lodos es indiscutiblemente un enfoque prometedor, conveniente y eficiente para su gestión (Stasta et al., 2006). Las últimas tendencias en este campo (combustión, co-combustión, pirólisis, gasificación y oxidación húmeda) permiten un manejo de estos residuos basado en la sostenibilidad (Fytili y Zabaniotou, 2008). El objetivo de estas tecnologías es el aprovechamiento energético de los lodos y la minimización de sus impactos ambientales, cumpliendo con una normativa cada vez más estricta. En los últimos años, estos procesos de valorización energética están atrayendo mucha atención en el ámbito de la investigación (Bridgwater, 2003).

La incineración es la combustión completa de la materia orgánica de los lodos (McKendry, 2002) y es el tratamiento térmico más extendido en la actualidad en Europa (Fytili y Zabaniotou, 2008). Sus principales ventajas son la reducción del volumen de los residuos, la destrucción térmica de compuestos orgánicos y la posibilidad de recuperar el contenido energético del lodo. Sin embargo, la incineración no constituye un método de eliminación completa, ya que el 30% aproximadamente de los sólidos permanece en forma de cenizas, que hay que gestionar adecuadamente y que generalmente se depositan en vertederos, pudiendo contener metales pesados considerados tóxicos. Otra limitación de este proceso es la emisión de contaminantes gaseosos a la atmósfera, como óxidos de azufre, óxidos de nitrógeno, dioxinas y furanos (Fytili y Zabaniotou, 2008; Werther y Ogada, 1999).

Los lodos de depuradora también se emplean en la co-combustión con carbón en centrales térmicas, en la co-incineración con residuos sólidos urbanos y en otros procesos de co-combustión como en la fabricación de ladrillos de arcilla o en hornos de cemento (Werther y Ogada, 1999).

La pirólisis es la descomposición térmica de los componentes orgánicos del lodo, en ausencia de oxígeno, a temperaturas que oscilan en el rango de 400 – 600°C (Werther y Ogada, 1999). Los productos de la pirólisis consisten en una fracción gaseosa no condensable (formada principalmente por hidrógeno, metano, monóxido de carbono y dióxido de carbono), una sólida (que se compone mayoritariamente de carbón) y una líquida (que es un aceite que presenta sustancias tales como ácido acético, acetona y metanol). El gas y el carbón producidos pueden utilizarse como combustible, mientras que el aceite, además, puede emplearse como materia

prima para las industrias químicas (Fytili y Zabaniotou, 2008). Una de sus ventajas es que genera menos emisiones gaseosas que la gasificación (Bridgwater, 2003).

La oxidación húmeda de lodos de depuración se lleva a cabo en fase acuosa a temperaturas de 150 a 330°C y presiones de 1 a 22 MPa utilizando oxígeno puro o atmosférico. Así, la materia orgánica se degrada térmicamente, se hidroliza y se convierte en dióxido de carbono, agua y nitrógeno (Fytili y Zabaniotou, 2008).

La gasificación es la conversión de los lodos en un gas combustible mediante la oxidación parcial de la materia orgánica a temperaturas en el rango de 750 – 900°C. El gas producto puede utilizarse como combustible en motores y turbinas de gas. Además, puede utilizarse como materia prima (gas de síntesis) en la producción de productos químicos como el metanol (McKendry, 2002). La gasificación de los lodos de depuradora es una tecnología económica y técnicamente viable, tiene una eficiencia energética mayor que otros procesos termoquímicos como la combustión y es la operación de valorización que más interés está atrayendo en los últimos años (Bridgwater, 2003).

### **2.1.3. Proceso de gasificación**

La gasificación es el proceso térmico en el que el contenido carbonoso de los lodos se transforma en un gas combustible y otras sustancias, en presencia de un agente gasificante (aire, oxígeno, vapor de agua o dióxido de carbono) a elevada temperatura y en una atmósfera netamente reductora (Fytili y Zabaniotou, 2008).

El producto de interés es el gas y está compuesto principalmente por monóxido de carbono, hidrógeno, dióxido de carbono, vapor de agua, metano, otros hidrocarburos ligeros y, en el caso de gasificar con aire, nitrógeno. Además de este gas, se obtiene un residuo sólido carbonoso (*char*) y una mezcla de gases condensables orgánicos aromáticos denominados alquitranes, que son indeseables al poder degradar equipos aguas abajo (Gil-Lalaguna et al., 2014).

El proceso puede agruparse, básicamente, en tres etapas. En primer lugar, se produce la evaporación de la humedad de los lodos (secado), según éstos se van calentando en el reactor hasta una temperatura de unos 200°C. A continuación tiene lugar la pirólisis o desvolatilización del fango entre los 350 – 500°C, generándose un residuo carbonoso o *char*, gases condensables (alquitranes) y un gas producto no condensable. Finalmente, tiene lugar la gasificación del carbonizado por oxidación incompleta a partir de los 600°C de temperatura (Dogru et al., 2002).

Durante la gasificación tienen lugar numerosas transformaciones físicas y químicas, tanto homogéneas como heterogéneas (Fytili y Zabaniotou, 2008; Campoy, 2009). Las principales reacciones químicas que tienen lugar en el gasificador son (De Andrés, 2010):

- |                                |                                      |   |
|--------------------------------|--------------------------------------|---|
| 1- Combustión incompleta:      | $C + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$ | $\Delta H^\circ = - 123,1 \text{ kJ/mol}$ |
| 2- Combustión completa:        | $C + O_2 \rightarrow CO_2$           | $\Delta H^\circ = - 393,8 \text{ kJ/mol}$ |
| 3- <i>Water gas reaction</i> : | $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$      | $\Delta H^\circ = 118,5 \text{ kJ/mol}$   |
| 4- Reacción de Boudouard:      | $C + CO_2 \rightarrow 2 CO$          | $\Delta H^\circ = 159,9 \text{ kJ/mol}$   |

## 2. INTRODUCCIÓN

---

5- Reacción de metanización:  $C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$   $\Delta H^\circ = - 87,5 \text{ kJ/mol}$

6- *Water gas shift reaction*:  $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$   $\Delta H^\circ = - 40,9 \text{ kJ/mol}$

7- Reformado con vapor:  $C_nH_m + n H_2O \rightarrow n CO + (n+m/2) H_2$

8- Reformado en seco:  $C_nH_m + n CO_2 \rightarrow (2n) CO + (m/2) H_2$

9- Craqueo térmico:  $C_nH_m \rightarrow n C + (m/2) H_2$

Las reacciones de combustión exotérmicas proporcionan el calor necesario para compensar las necesidades energéticas de las reacciones endotérmicas que se producen en el secado, en la pirólisis y en la zona de reducción (De Andrés, 2010).

### - Tipos de gasificadores

Existen distintos tipos de gasificadores. Teniendo en cuenta el contacto gas-sólido en su interior, los equipos se dividen en (Campoy, 2009):

*\*Gasificadores de lecho fijo con flujo en equicorriente (Downdraft)*: El sólido entra por la parte superior junto con el agente gasificante. Se caracterizan por generar un gas relativamente limpio de alquitranes, con una conversión de carbono elevada y alta temperatura de salida. Sin embargo, su capacidad específica es baja y su potencial de escalado es muy limitado.

*\*Gasificadores de lecho fijo con flujo en contracorriente (Updraft)*: El sólido es introducido por la parte superior del reactor y desciende lentamente en contracorriente con el agente gasificante, que se introduce por la parte inferior. Presenta una mayor eficiencia térmica al salir el gas a baja temperatura, pero tiene el inconveniente de tener una elevada carga de alquitranes.

*\*Gasificadores de lecho fluidizado*: El agente gasificante se inyecta por la parte inferior y circula por el interior del reactor de forma que el lecho de sólido inerte se mantiene en suspensión. La biomasa reacciona en el lecho, donde se favorece la transferencia de materia y energía entre el sólido y el gas. Las principales ventajas son el excelente control de la temperatura y de las velocidades de reacción, la alta capacidad específica y su potencial de escalado a mayores tamaños. Como inconvenientes destacan los niveles moderados de alquitranes y partículas en el gas de salida y una menor conversión de carbono que los de lecho fijo. Existen dos variedades: los burbujeantes y los circulantes. En los gasificadores de lecho fluidizado burbujeante la velocidad de fluidización es menor y no hay una circulación de sólidos significativa. En los gasificadores de lecho fluidizado circulante la velocidad de fluidización es mayor y existe circulación de sólidos, por lo que se emplea un ciclón y un sistema de retorno al reactor.

La Figura 2.2, presenta un esquema de los distintos tipos de gasificadores.

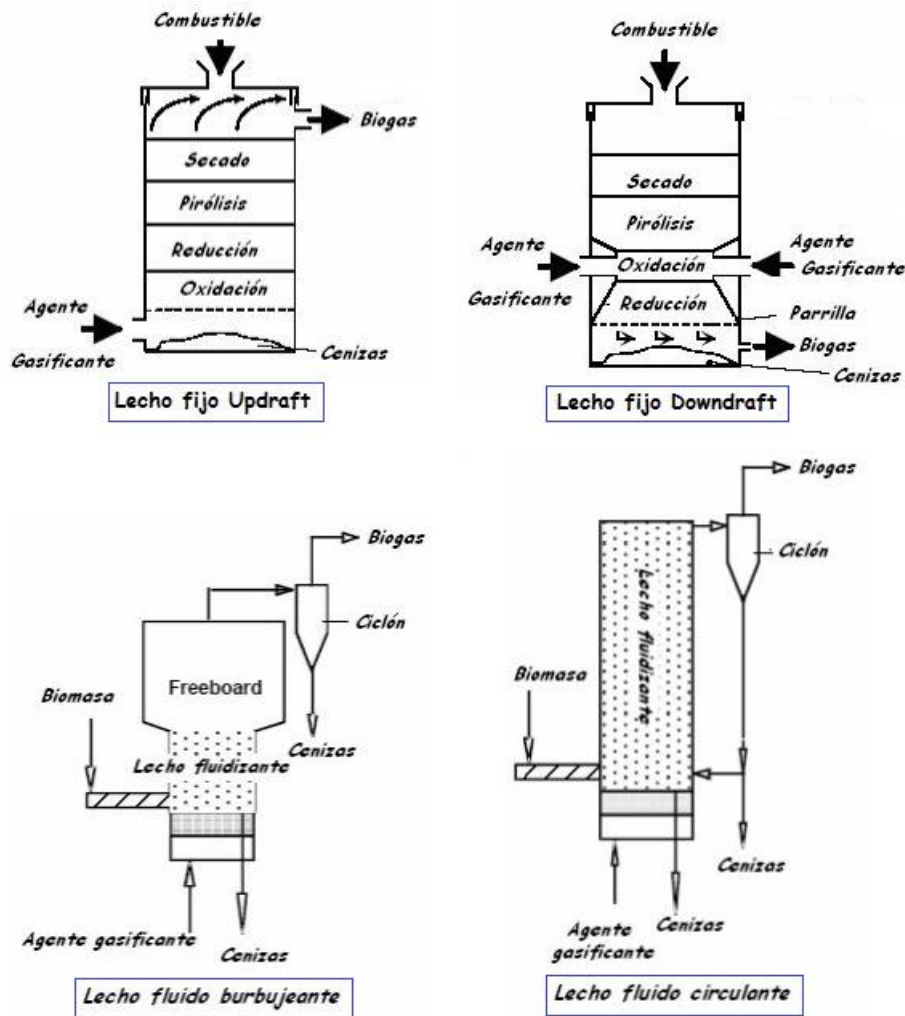


Figura 2.2. Tipos de gasificadores. Fuente: Elaboración propia adaptada

### - Influencia de las condiciones de operación

La calidad del gas producto de la gasificación está determinada por la composición de la materia prima y el tipo de gasificador. También depende de las condiciones de operación y del agente gasificante empleado. Las variables de funcionamiento más influyentes son (Gil-Lalaguna, 2015):

*\*Temperatura (T):* Es uno de los parámetros más determinantes en el proceso de gasificación de los lodos, afectando tanto a la cinética como a la termodinámica de las reacciones. En general, bajas temperaturas de gasificación conllevan un alto contenido en alquitrán y una baja concentración de monóxido de carbono e hidrógeno en el gas de salida. El intervalo de temperatura habitual para el proceso de gasificación de biomasa es 750 – 900°C para conseguir una alta conversión de carbono y un bajo contenido de alquitrán en el gas. Un aumento de la temperatura está operacionalmente limitado, debido al riesgo de fusión y aglomeración de las cenizas y a la necesidad de materiales de construcción del equipo de mayor resistencia.

*\*Agente gasificante:* Es un factor clave en la composición y aplicabilidad del gas producto. El aire es el agente gasificante más habitual debido a su bajo coste, pero el nitrógeno introducido diluye la mezcla gaseosa, dando lugar a un gas con bajo poder calorífico (4 – 7 MJ/Nm<sup>3</sup>). Este

contenido energético suele ser suficiente para el uso del gas en calderas, motores de combustión interna y turbinas de gas. La gasificación con oxígeno puro evita la dilución del gas, aumentando su poder calorífico ( $10 - 20 \text{ MJ/Nm}^3$ ). Sin embargo, el coste del proceso aumenta considerablemente debido a la necesidad de una unidad de separación del oxígeno del aire. El vapor de agua también puede emplearse como agente gasificante y su presencia favorece la producción de hidrógeno. Por tanto, se produce un gas de síntesis de alta calidad que puede utilizarse como materia prima para la obtención de productos químicos y combustibles sintéticos.

*\*Ratio equivalente (ER):* Es el cociente entre la cantidad de oxígeno alimentado por unidad de masa de lodo y la cantidad estequiométrica de oxígeno necesaria para la combustión completa de la unidad de masa de lodo. Normalmente, su valor oscila entre 0,2 y 0,4. Un aumento de *ratio* equivalente facilita la combustión de la materia volátil debido a la mayor disponibilidad de oxígeno, mejorando la producción de gas y la conversión del sólido. Sin embargo, valores de *ratio* equivalente muy elevados incrementan el contenido de  $\text{CO}_2$  y  $\text{N}_2$  (en el caso de gasificar con aire), disminuyendo el poder calorífico del gas.

*\*Ratio vapor/biomasa (S/B):* Es la relación másica entre el vapor de agua empleado y la biomasa alimentada (en el caso de gasificación con vapor de agua). Un aumento de este *ratio* favorece la conversión del sólido, aumenta la producción de hidrógeno y disminuye la concentración de alquitrán en el gas. Sin embargo, superado un límite puede repercutir de forma negativa en la distribución de productos, como consecuencia de la disminución de la temperatura de reacción.

### - Aplicaciones

La gasificación se presenta como una de las tecnologías más prometedoras para la obtención de energía. El gas de síntesis producido, una vez depurado y acondicionado, se puede utilizar como combustible en motores de combustión interna y en turbinas de gas para la generación de electricidad (Campoy, 2009). También se puede utilizar como combustible en ciclos combinados (IGCC) en los que además de la turbina de gas se incorpora una turbina de vapor y una caldera de recuperación de calor residual. Esta alternativa resulta viable económicamente, presenta una mayor eficiencia que otras tecnologías convencionales y un menor impacto ambiental (Gil-Lalaguna et al., 2014).

Recientemente, la gasificación de biomasa ha atraído un gran interés para producir gas de síntesis rico en hidrógeno para su uso en pilas de combustible en la generación de energía eléctrica (Ahmed et al., 2012) y como materia prima en la síntesis y obtención de productos químicos como metanol, amoníaco y combustibles líquidos (Gil-Lalaguna et al., 2014).

#### **2.1.4. Modelos de gasificación**

Como se ha mencionado anteriormente, la gasificación es un proceso complejo que involucra numerosas especies y múltiples fases, produciéndose simultáneamente una serie de reacciones químicas y diversas interacciones físicas (Gómez-Barea y Leckner, 2010). En los últimos años se han propuesto diferentes modelos (matemáticos y computacionales) para tratar de explicar y comprender la gasificación de biomasa (Puig-Arnavat et al., 2010). Estos modelos son muy útiles para investigadores e industrias porque permiten diseñar, simular y optimizar los procesos

y los equipos con gran fiabilidad, pudiendo representar el escenario real con precisión y bajo coste (Rajendran et al., 2014). El objetivo de estos modelos es predecir el comportamiento y la eficiencia de un gasificador, analizando la influencia de los distintos parámetros de funcionamiento (temperatura, *ratio* equivalente, relación vapor/biomasa, etc.) en la composición y valor energético de los gases generados (Kaushal et al., 2010). Tras el desarrollo del modelo, éste debe ser verificado y validado con datos reales basados en la experimentación (Corella y Sanz, 2005). Debido a la amplia variedad de tecnologías de gasificación, tipos de reactores y composiciones de la alimentación, no existe un modelo universal que represente todos los procesos, sino que se han desarrollado y publicado diversos modelos atendiendo a distintas clasificaciones según su finalidad (Gómez-Barea y Leckner, 2010).

### - Modelos matemáticos

Los modelos matemáticos proporcionan una buena representación de los fenómenos físicos y químicos involucrados en el proceso de gasificación de biomasa. La complejidad numérica y el elevado tiempo requerido en la resolución de un modelo riguroso se puede simplificar mediante la formulación de hipótesis bajo unas condiciones de operación específicas, obteniendo modelos semi-empíricos razonables y manejables (Gómez-Barea y Leckner, 2010).

Estos modelos pueden dividirse en tres grupos: modelos de equilibrio termodinámico, modelos de velocidad cinética y modelos de redes neuronales artificiales. Estos últimos presentan un enfoque no mecanicista y hacen uso de la regresión para obtener las correlaciones entre los flujos de entrada y salida del proceso (Ahmed et al., 2012). Se basan en un gran número de datos experimentales, su significado físico es difícil de interpretar y sus habilidades de adaptación y escalado están restringidas (Ngo et al., 2011). Por todo ello, su uso no está muy extendido en los estudios de gasificación de biomasa (Puig-Arnavat et al., 2010).

Los modelos de velocidad cinética tienen en cuenta los mecanismos cinéticos y los fenómenos de transferencia entre las fases sólida y gaseosa, incorporando la constante de velocidad de las reacciones químicas y la hidrodinámica del sistema. Predicen el progreso del sistema en el tiempo y los perfiles de composición del gas producto a lo largo del reactor. Son precisos y detallados, pero son complejos y contienen parámetros que limitan su aplicabilidad a diferentes plantas (Ahmed et al., 2012).

Los modelos de equilibrio predicen el rendimiento máximo alcanzable de un producto deseado en un sistema de reacción. Son valiosos para el diseño, evaluación y mejora del proceso de gasificación, pues proporcionan los límites termodinámicos del sistema (Karmakar y Datta, 2011). Los cálculos de equilibrio no dependen del tiempo necesario para alcanzar el régimen permanente ni del tamaño y geometría del reactor, siendo adecuados para el estudio preliminar de la influencia de los parámetros de funcionamiento del proceso (Puig-Arnavat et al., 2010).

Existen dos enfoques para los modelos de equilibrio, aunque ambos son esencialmente equivalentes: estequiométricos y no estequiométricos. Los modelos estequiométricos requieren un mecanismo de reacción claramente definido, que incorpore la constante de equilibrio de todas las reacciones involucradas en el sistema. Los modelos no estequiométricos no necesitan la especificación del mecanismo de reacción, pues se basan únicamente en la minimización de la energía libre de Gibbs, con las restricciones del balance de masa de las especies (Li et al., 2001).



Se han publicado algunos trabajos sobre la modelización matemática del proceso de gasificación. Schuster et al. (2001) desarrollaron un modelo de equilibrio para estudiar la gasificación de biomasa con vapor en un reactor de doble lecho fluidizado. Zainal et al. (2001) modelaron el proceso de gasificación para diferentes tipos de biomasa basándose en la hipótesis de equilibrio estequiométrico para predecir el rendimiento de los reactores de lecho fijo descendente. Li et al. (2001) crearon un modelo de equilibrio no estequiométrico para predecir la composición del gas producto en un gasificador de carbón en lecho fluidizado circulante. Petersen y Werther (2005) diseñaron un modelo cinético para la gasificación de los lodos de depuración en un reactor de lecho fluidizado circulante, incluyendo una red completa de reacciones y la caracterización de la hidrodinámica del proceso.

### - Modelos computacionales

Tras el desarrollo del modelo matemático de un sistema de procesamiento de biomasa dado y su validación con datos experimentales, el modelo puede utilizarse para predecir o simular el comportamiento del sistema. Cuando se necesita trabajar con diagramas de flujo completos que involucren numerosas ecuaciones y variables, es ventajoso utilizar herramientas de simulación que evalúan el rendimiento del proceso en función de las diferentes condiciones de operación en un tiempo razonable y con poco esfuerzo (Ahmed et al., 2012).

Existen dos tipos de simuladores de procesos: los que operan en estado estacionario (Aspen Plus, Aspen Hysys, PRO/II, Petronas Icon, ChemCad, etc.) y los que trabajan en régimen transitorio (Matlab, Ansys Fluid, CFC 2000, etc.). Estos últimos desarrollan modelos computacionales de simulación fluido-dinámica (CFD) que representan la dependencia del tiempo de los procesos mediante la incorporación de los términos de acumulación en las ecuaciones de conservación (masa, energía y momento). Son muy útiles para el control de procesos, pues reproducen el cambio de comportamiento de las operaciones en tiempo real (Ahmed et al., 2012). Son relativamente nuevos, pues se emplean desde la última década, y ofrecen prometedoras expectativas. Sin embargo, aún requieren mejoras importantes, ya que emplean considerables tiempos computacionales cuando involucran múltiples reacciones químicas (Gómez-Barea y Leckner, 2010).

Los simuladores que trabajan en régimen permanente no tienen en cuenta la variación de las propiedades del proceso en el tiempo. Entre estos programas de *software* destaca el paquete Aspen Plus, que fue desarrollado por el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) para el Departamento de Energía de Estados Unidos con el fin de evaluar operaciones de conversión de hidrocarburos en estado estacionario (Doherty et al., 2010). Este simulador de procesos se ha convertido en una potente herramienta para ingenieros e investigadores y está ampliamente aceptado en la industria para la evaluación de una gran variedad de operaciones (Sotudeh-Gharebaagh et al., 1998).

Aspen Plus utiliza bloques convencionales predefinidos para resolver las operaciones unitarias del proceso (reactores, intercambiadores de calor, separadores, bombas, etc.). El usuario coloca estos bloques en un diagrama de flujo, especificando las corrientes de masa y energía. Para los cálculos de simulación, el programa utiliza una extensa base de datos de propiedades físicas y químicas. Para poder desarrollar habilidades más sofisticadas, el programa permite al usuario la inserción de subrutinas en código Fortran (Doherty et al., 2009). Esta flexibilidad proporciona a Aspen Plus un ágil manejo de procesos complejos, tales como la gasificación (Gómez-Barea y Leckner, 2010). Existen varios modelos recogidos en la literatura que utilizan el *software*

Aspen Plus para simular las distintas tecnologías de gasificación de biomasa en lecho fluidizado e investigar el efecto de las diferentes variables de funcionamiento en la eficiencia del proceso.

Shen et al. (2008) simularon con Aspen Plus la gasificación de biomasa en un gasificador de lechos fluidizados interconectados utilizando una mezcla de aire y vapor de agua como agente gasificante. Se desarrolló un modelo en estado estacionario que asume el equilibrio químico de las reacciones y sirvió para estudiar el efecto de la temperatura y la relación vapor/biomasa sobre el rendimiento de producción de hidrógeno.

Doherty et al. (2009) diseñaron un modelo de simulación de equilibrio con Aspen Plus para el funcionamiento de un gasificador de biomasa en lecho fluidizado circulante que sirvió para predecir la composición del gas de síntesis, el valor energético y la eficiencia de conversión. El modelo, basado en la minimización de la energía libre de Gibbs, evaluó la influencia de diferentes variables (temperatura de gasificación, relación equivalente y precalentamiento del aire) en la composición del gas generado.

Beheshti et al. (2015) desarrollaron con Aspen Plus un modelo cinético del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fluidizado burbujeante a presión atmosférica. Se tuvo en cuenta tanto la cinética como la hidrodinámica de la operación, introduciendo subrutinas externas en código Fortran. El modelo tuvo en cuenta la formación de alquitranes y distinguió entre las regiones del lecho y del *freeboard* dentro del gasificador para analizar los parámetros del sistema. Este modelo permitió estudiar el efecto de la temperatura de reacción, el *ratio* equivalente, la relación vapor/biomasa y el tamaño de la partícula en la composición del gas y en el rendimiento de producción de hidrógeno.

### - Método de la minimización de la energía libre de Gibbs

Como se ha mencionado anteriormente, los modelos de equilibrio termodinámico (no estequiométricos) se basan en la minimización de la energía libre de Gibbs total del sistema (Jarunthammachote y Dutta, 2008), es decir:

$$\min_{n_i} \frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^N n_i \left( \frac{\Delta G_{f,i}^0}{RT} + \ln \frac{n_i}{\sum n_i} \right)$$

La energía libre de Gibbs total  $G$  de un sistema (de  $N$  especies a  $P$  y  $T$  dadas) se define como:

$$G = \sum_{i=1}^N n_i \mu_i$$

donde  $n_i$  es el número de moles de la especie  $i$  y  $\mu_i$  es la energía libre molar parcial o potencial químico de la especie  $i$  (con  $i = 1, \dots, N$ ).

Dividiendo por  $RT$  se obtiene una expresión más conveniente, donde  $R$  es la constante universal de los gases y  $T$  es la temperatura del sistema.

$$g = \frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^N n_i \frac{\mu_i}{RT}$$

El potencial químico  $\mu_i$  de la especie  $i$  se puede representar por:

$$\mu_i = G_i^0 + RT \ln \frac{f_i}{f_i^0}$$

donde el superíndice (<sup>0</sup>) se refiere a magnitudes termodinámicas en estado estándar y  $f_i$  es la fugacidad de la especie  $i$ .

En términos de presión, la expresión del potencial químico  $\mu_i$  viene dada por:

$$\mu_i = G_i^0 + RT \ln \frac{\phi_i P_i}{P^0}$$

Si todos los gases del sistema se consideran como gases ideales a una atmósfera de presión, entonces:

$$\mu_i = \Delta G_{f,i}^0 + RT \ln(y_i)$$

siendo  $y_i$  la fracción molar de la especie  $i$ , es decir, la relación entre  $n_i$  y el número total de moles del sistema.

$$y_i = \frac{n_i}{\sum n_i}$$

$\Delta G_{f,i}^0$  es la energía libre de Gibbs estándar de formación de la especie  $i$ , estableciéndose igual a cero si la sustancia se trata de un elemento.

Así, la energía libre de Gibbs total de un sistema, queda:

$$G = \sum_{i=1}^N n_i \left( \Delta G_{f,i}^0 + RT \ln \frac{n_i}{\sum n_i} \right)$$

$$g = \frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^N n_i \left( \frac{\Delta G_{f,i}^0}{RT} + \ln \frac{n_i}{\sum n_i} \right)$$

El problema consiste en encontrar los valores de  $n_i$  que minimicen la función objetivo  $G$  (o equivalentemente  $g$ ). El método más apropiado para resolverlo es el de los multiplicadores de Lagrange.

Sin embargo, los  $n_i$  moles no son independientes, ya que deben cumplir el balance molar de los átomos del sistema dado por la restricción:

$$\sum_{i=1}^N a_{ij} n_i = A_j$$

donde  $a_{ij}$  es el número de átomos del elemento  $j$  en un mol de la especie  $i$  y  $A_j$  es el número total de átomos del elemento  $j$  en la mezcla de reacción (con  $j = 1, \dots, k$ ).

La función de Lagrange ( $L$ ) se construye, por tanto:

$$L = g + \sum_{j=1}^k \lambda_j \left( A_j - \sum_{i=1}^N a_{ij} n_i \right)$$

Las derivadas parciales con respecto a  $n_i$  se igualan a cero con el fin de encontrar el punto mínimo:

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_i} \right) = 0$$

Se trata de un conjunto de  $N$  ecuaciones que, junto con los  $k$  balances atómicos permite determinar los  $N$  valores de  $n_i$  en el equilibrio y los  $k$  lagrangianos  $\lambda_j$ . Este sistema de ecuaciones no lineales se resuelve mediante técnicas iterativas, como el método de Newton-Raphson (Jarunthammachote y Dutta, 2008).

## 2.2. MOTIVACIÓN

Actualmente existe una creciente preocupación por conseguir un desarrollo sostenible, lo que no sólo supone un interés por cuestiones medioambientales, sino que también implica responsabilidades de carácter social y económico (Fytili y Zabaniotou, 2008). En este sentido, la creciente demanda de energía y el aumento de la generación de residuos son dos de los mayores retos a los que se enfrenta la sociedad moderna (Roche et al., 2012).

Por un lado, debido al progresivo agotamiento de los combustibles fósiles y a los efectos desfavorables sobre el medioambiente asociados a su consumo, surge la necesidad de buscar nuevas fuentes de energía renovables y de menor contaminación ambiental (Loha et al., 2011). La biomasa y, concretamente, los residuos como los lodos de depuración se posicionan como una potencial alternativa a los combustibles fósiles, por lo que se están estudiando nuevos y prometedores métodos para su transformación energética (Zainal et al., 2001).

Por otro lado, la gestión y evacuación de la gran cantidad de lodos de depuración generados son cada vez más complicadas debido a las estrictas condiciones que impone la legislación actual, en relación a su eliminación en vertederos y a su uso como fertilizante agrícola (Inganzo, 2004; Fytili y Zabaniotou, 2008).

En las últimas décadas, se ha producido en Europa un cambio importante en las vías de gestión de los lodos. Se están desarrollando nuevas tecnologías que disminuyen los costes y los impactos ambientales derivados del manejo tradicional de estos residuos y que fomentan su valorización a través de procesos termoquímicos. La gasificación es la tecnología que está

atrayendo mayor interés en los investigadores, pues consigue reducir el volumen de lodos y limitar su eliminación en vertederos, permitiendo el aprovechamiento del gas de salida como combustible para la generación de energía y como materia prima para la síntesis de productos químicos de alto valor añadido (Dogru et al., 2002; Bridgwater, 2003).

La gasificación de los lodos es un proceso complejo que involucra múltiples reacciones y transformaciones. Por ello, es útil el empleo de modelos de simulación que ayuden a estudiar el comportamiento del sistema y permitan predecir la eficiencia del proceso bajo distintas condiciones de operación con alta fiabilidad y bajo coste (Ahmed et al., 2012). Existen numerosas herramientas de *software* de simulación de procesos, entre las cuales destaca Aspen Plus por su flexibilidad y su intuitivo manejo (Puig-Arnavat et al., 2010).

En este contexto se sitúa este Proyecto Fin de Carrera, cuyo propósito es modelar, con el *software* de simulación Aspen Plus, el proceso de gasificación de lodos de depuradoras urbanas y, de esta manera, completar el trabajo que el Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid está llevando a cabo en los últimos años en colaboración con el Canal de Isabel II.

## 3. METODOLOGÍA

Se ha diseñado un modelo de simulación del proceso de gasificación de lodos de depuradoras urbanas utilizando la herramienta Aspen Plus, a partir de datos de ensayos previos en la planta a escala de laboratorio ubicada en el Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid. Los resultados experimentales previos corresponden a la investigación “Proyecto de investigación para evaluar la eficacia del proceso de gasificación de lodos y su aplicabilidad en el Canal de Isabel II”, que ha propiciado la realización de dos Tesis Doctorales (De Andrés, 2010; Roche, 2014).

### 3.1. ENSAYOS DE LABORATORIO PREVIOS

#### 3.1.1. Caracterización de lodos

En los experimentos previos realizados en laboratorio se emplearon muestras de lodos de depuradoras urbanas secados térmicamente en una planta de la Comunidad de Madrid. Se trata de unos agregados de forma esférica de 2-5 mm de diámetro, cuyo aspecto se presenta en la Figura 3.1.



Figura 3.1. Muestras de lodo seco empleadas en los ensayos. Fuente: Roche, 2014

Se llevaron a cabo ensayos de caracterización físico-química para determinar la composición y las propiedades del lodo de estudio, siguiendo las normas UNE-EN serie 2001. En el análisis inmediato o proximal se estableció el porcentaje en peso de humedad, ceniza y materia orgánica del lodo en base seca (excepto para la humedad). En el análisis último o elemental de las muestras se halló la cantidad de C, H, N, S y O del lodo seco (en porcentaje en peso).

Los resultados obtenidos en estas pruebas se muestran en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Resultados de los ensayos de caracterización de lodos. Fuente: De Andrés, 2010

PARÁMETRO	VALOR LODO *
<b>Análisis Proximal</b>	
Humedad (%)	10
Materia Orgánica (%)	57,8
Cenizas (%)	42,2
<b>Análisis Elemental</b>	
Carbono Total (%)	28,9
Hidrógeno (%)	4,8
Nitrógeno (%)	4,5
Azufre (%)	0,9
Oxígeno (%) **	18,7

\*Todos los valores excepto la humedad están referidos a masa seca

\*\*El oxígeno se calcula por diferencia (Cenizas + C + H + N + S + O = 100)

En base húmeda, los resultados obtenidos quedan según la Tabla 3.2.

Tabla 3.2. Composición másica de los lodos en base húmeda.

Fuente: Elaboración propia

PARÁMETRO	VALOR BASE HÚMEDA ***
<b>Humedad W (%)</b>	10
<b>Cenizas (%)</b>	37,98
<b>Materia Orgánica (%)</b>	52,02
Carbono Total (%)	26,01
Hidrógeno (%)	4,32
Nitrógeno (%)	4,05
Azufre (%)	0,81
Oxígeno (%)	16,83

\*\*\* Valores referidos a la masa total del lodo (base húmeda): W + Cenizas + C + H + N + S + O = 100

A partir de los valores recogidos en la Tabla 3.2 se determina el poder calorífico superior (PCS) y el poder calorífico inferior (PCI) del lodo de estudio.

$$\text{PCS (kJ/kg)} = 337,3 \cdot C + 1418,9 \cdot (H - O/8) + 93,1 \cdot S + 23,3 \cdot N = 12087,6$$

$$\text{PCI (kJ/kg)} = \text{PCS} - 2500 \cdot (1/100) \cdot [9 \cdot (H - O/8) + W] = 11338,9$$

El poder calorífico inferior (PCI) del lodo se calcula mediante la fórmula de Dulong modificada y sirve para determinar la eficiencia del proceso de gasificación (EG), que se define como el cociente entre el PCI de los gases producidos y el PCI del lodo introducido.

### 3.1.2. Planta a escala de laboratorio

Los experimentos de gasificación en continuo se realizaron en un gasificador de lecho fluidizado que opera a presión atmosférica. Consiste en un reactor de acero inoxidable (AISI 316 L) de 700 mm de altura y 32 mm de diámetro interno, con un ensanchamiento en su parte

superior (*freeboard*) de 46 mm de diámetro que duplica la superficie interna. Ambos elementos se calientan mediante un horno eléctrico hasta la temperatura de operación. Sobre el gasificador existe un sensor de presión diferencial para controlar la fluidización del lecho y una sonda termopar para verificar la temperatura del proceso.

La alimentación del lodo se realiza por la parte inferior del lecho para mejorar la mezcla entre la biomasa y el material del lecho, pues los lodos tienen una densidad menor que la arena de sílice y tienden a fluir hacia la parte superior. Este sistema de alimentación de los lodos al reactor se compone de una tolva (en la cual se introducen los sólidos) y dos tornillos (uno dosificador y otro de tipo lanzadera). El tornillo dosificador es vertical y al girar consigue controlar el caudal (g/min) requerido en cada ensayo. Los lodos secos caen sobre el tornillo lanzadera horizontal que, al girar, los introduce directamente en el reactor mediante un tubo de 12,7 mm de diámetro externo situado unos milímetros por encima del plato distribuidor del reactor (cuyo tamaño de poro es de 0,1 mm). Esta tubería está equipada con un serpentín de refrigeración para evitar posibles obstrucciones como consecuencia de la pirólisis de los lodos antes de entrar al gasificador.

El aire se introduce en el reactor con ayuda de un compresor y su caudal se regula mediante un medidor de flujo másico. El aire se distribuye gracias a dos rotámetros, dividiéndose esta alimentación en dos corrientes: una se deriva a la tolva de alimentación para facilitar la entrada de los lodos en el gasificador y la otra se introduce en el reactor a través del plato distribuidor que sustenta el lecho. Este último flujo de aire se calienta previamente a 450°C mediante un precalentador para disminuir las pérdidas térmicas.

En las pruebas que requieren mezclas de aire/H<sub>2</sub>O como agente gasificante se utiliza una bomba peristáltica para la alimentación del agua. Con la ayuda de un sistema eléctrico, el agua se introduce en el gasificador en forma de vapor a 500°C de temperatura.

La altura del lecho es variable (de 100 mm a 200 mm) y se mantiene fija en cada uno de los ensayos ( $H_b = 100$  mm) mediante una tubería concéntrica (de 12,7 mm de diámetro externo) que atraviesa el plato de distribución. Esta tubería permite recoger el material que rebosa y lo almacena en un depósito de descarga.

Los gases producidos salen por la parte superior del reactor y, a través de una tubería mantenida a 450°C, se conducen a un ciclón y a un filtro micrónico donde se separan las partículas presentes. Ambos dispositivos se encuentran en el interior de una caja caliente a 250°C para evitar la condensación de los alquitranes, lo que podría provocar el ensuciamiento del sistema.

El gas saliente del filtro se hace pasar por una serie de cinco condensadores que contienen isopropanol, los cuales están situados sobre un baño de hielo. De esta manera, se recogen los alquitranes y el agua contenidos en el gas, antes de completar su limpieza forzándolo a pasar por un filtro de agua, un filtro con gel de sílice y un filtro de algodón.

Finalmente, se determina el caudal de gas mediante un medidor de flujo másico y se analiza su composición con un cromatógrafo de gases.

En la Figura 3.2 se muestra una fotografía de la planta de gasificación a escala de laboratorio y en la Figura 3.3 se presenta un esquema de la misma.





Figura 3.2. Planta de gasificación a escala de laboratorio. Fuente: De Andrés, 2010

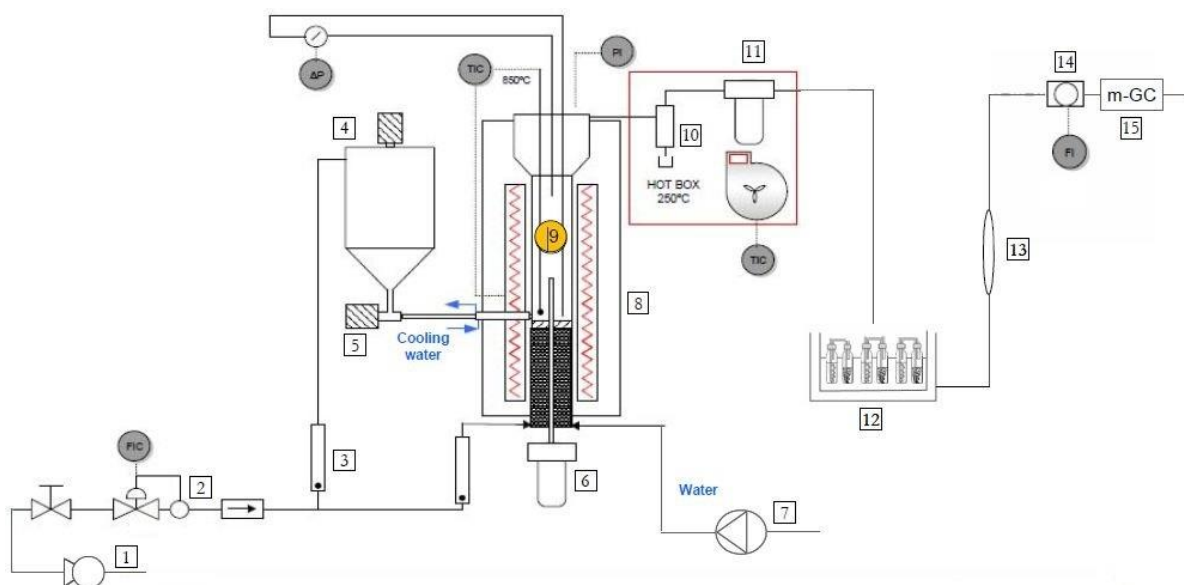


Figura 3.3. Esquema de la planta de gasificación a escala de laboratorio: (1) compresor; (2) controlador de caudal másico; (3) rotámetro; (4) tolva; (5) tornillo de alimentación; (6) depósito de descarga; (7) bomba peristáltica; (8) horno; (9) reactor de acero; (10) ciclón; (11) filtro caliente; (12) tren de condensación; (13) filtros de agua, gel de sílice y algodón; (14) medidor de flujo másico; (15) micro-cromatógrafo de gases.

Fuente: De Andrés, 2010

#### 3.1.3. Ensayos de gasificación en continuo

El lodo de depuradora se molido y tamizado para obtener la granulometría de 0,3 mm de tamaño de partícula. En los experimentos se empleó arena de sílice como material para la formación del lecho fluidizado. Para favorecer la fluidización, el lodo introducido fue mezclado con una cantidad de arena de sílice del 20% en peso del fango utilizado. Dicha mezcla se alimenta al gasificador durante 20-30 minutos hasta alcanzar unas condiciones estables, siendo la duración total de cada ensayo de 60 minutos.

Las variables modificadas durante las pruebas de gasificación en continuo son:

*\*Temperatura (T):* Se realizaron ensayos a tres temperaturas de gasificación diferentes (750°C, 800°C y 850°C).

*\*Ratio equivalente (ER):* El *ratio* equivalente es la relación entre la masa de aire introducido en el reactor y la masa de aire estequiométrico requerido para una combustión completa. Los valores de ER utilizados fueron 0,2, 0,3 y 0,4, a una temperatura de gasificación constante de 800°C.

*\*Agente gasificante y ratio vapor/biomasa (S/B):* Se realizaron ensayos utilizando como agente gasificante únicamente aire o una mezcla de aire/vapor de agua. En este último caso, el *ratio* vapor/biomasa varía entre 0,5 y 1 (cociente entre la masa de agua y la masa de lodo libre de humedad y ceniza), manteniendo un ER = 0,3 y temperatura constante de 800°C. Se efectuaron pruebas adicionales manteniendo un S/B = 0,5 y variando la temperatura entre 750 – 850°C.

Las condiciones de operación de cada uno de los nueve ensayos seleccionados para la realización de este proyecto se muestran en la Tabla 3.3.

Tabla 3.3. Condiciones de operación de los ensayos de gasificación. Fuente: Elaboración propia

Nº Ensayo	T (°C)	ER	S/B
1	800	0,3	0
2	750	0,3	0
3	850	0,3	0
4	800	0,2	0
5	800	0,4	0
6	800	0,3	0,5
7	800	0,3	1
8	750	0,3	0,5
9	850	0,3	0,5

La cantidad de aire necesaria para la combustión completa de 1 g de lodo es 2,93 NL. La fórmula para calcular el *ratio* equivalente es, por tanto:

$$ER = \frac{Q_{aire}}{Q_{lodo} \cdot 2,93}$$

El caudal de aire de los ensayos de gasificación se fijó para asegurar que su velocidad de entrada al gasificador fuera aproximadamente cuatro veces la velocidad mínima de fluidización. Su valor en todas las pruebas es  $Q_{aire} = 1,28$  NL/min. El caudal del lodo (g/min) varía según el ER requerido en cada ensayo.

La cantidad de agua introducida en el reactor en los ensayos que utilizan una mezcla de aire/vapor de agua como agente gasificante se calculó según el valor S/B requerido.

$$S/B = \frac{Q_{agua}}{Q_{lodo,daf}}$$

Para el cálculo del PCI del gas de salida se han tenido en cuenta los valores del poder calorífico inferior de los gases combustibles H<sub>2</sub>, CO y CH<sub>4</sub> (Tchobanoglous y Kreith, 2002; Waldheim y Nilsson, 2001). Estos datos se recogen en la Tabla 3.4.

Tabla 3.4. Valores de PCI de los gases combustibles.  
Fuente: Tchobanoglous y Kreith, 2002; Waldheim y Nilsson, 2001

Compuesto	PCI (MJ/kg)	PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )
H <sub>2</sub>	120,97	10,79
CO	10,11	12,62
CH <sub>4</sub>	50,01	35,81

El rendimiento o producción total de gases ( $Y_{gas}$ ) es importante para la evaluación global del proceso y representa la relación entre la cantidad de gas de síntesis producido y la cantidad de lodo alimentado en el gasificador (libre de humedad y cenizas).

$$Y_{gas} \text{ (Nm}^3\text{/kg lodo, daf)} = \frac{Q_{gases}}{Q_{lodo,daf}}$$

La conversión de carbono ( $X_c$ ) proporciona una idea del grado de desarrollo del proceso y se define como el cociente entre la masa de carbono contenido en el gas de salida y la masa de carbono en el lodo introducido.

$$X_c \text{ (\%)} = \frac{\text{kg } C_{gas}}{\text{kg } C_{lodo}} \cdot 100$$

La eficiencia de gasificación (EG) es el parámetro fundamental para evaluar el proceso de gasificación y se define como el cociente entre el PCI de los gases producidos y el PCI del lodo introducido.

$$EG \text{ (\%)} = \frac{\text{PCI gases producidos}}{\text{PCI lodo introducido}} \cdot 100$$

Los resultados de las pruebas de gasificación se presentan en la Tabla 3.5.

### 3. METODOLOGÍA

Tabla 3.5. Resultados de los ensayos de gasificación. Fuente: De Andrés, 2010

Parámetro	Nº Ensayo								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
T (°C)	800	750	850	800	800	800	800	750	850
ER	0,3	0,3	0,3	0,2	0,4	0,3	0,3	0,3	0,3
S/B	0	0	0	0	0	0,5	1	0,5	0,5
Q <sub>lodos</sub> (g/min)	1,44	1,44	1,44	2,16	1,08	1,44	1,44	1,44	1,44
Composición gases (% v/v, base seca)									
H <sub>2</sub>	10,4	7,6	12,1	14,0	8,5	11,0	12,0	9,9	15,5
N <sub>2</sub>	60,8	65,1	57,7	52,2	65,3	59,2	58,5	60,8	53,8
CH <sub>4</sub>	3,0	2,7	3,3	4,9	2,4	3,1	2,7	2,8	3,2
CO	8,0	6,9	10,1	10,7	6,9	8,4	8,6	7,7	10,4
CO <sub>2</sub>	14,1	14,1	13,1	13,6	13,8	14,8	15,2	14,8	14,1
Y <sub>gas</sub> (Nm <sup>3</sup> /kg lodo, <i>daf</i> )	2,37	2,32	2,45	1,89	2,92	2,60	2,62	2,44	2,75
X <sub>c</sub> (%)	65,28	60,54	71,30	60,36	74,33	74,01	75,22	66,98	82,25
PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	3,3	2,8	3,9	4,8	2,7	3,5	3,5	3,2	4,2
EG (%)	37,2	30,2	45,2	43,0	37,9	41,0	41,1	35,2	53,1

ER: *ratio* equivalente (masa de aire introducido / masa de aire estequiométrico)

S/B: *ratio* vapor/biomasa (masa de agua / masa de lodos, *daf*, introducidos en el reactor)

Y<sub>gas</sub>: producción total de gases

X<sub>c</sub>: conversión del carbón (masa de carbono en los gases producidos / masa de carbono introducido en el gasificador)

EG: eficiencia de la gasificación (PCI gases producidos / PCI lodo introducido)

*daf*: libre de humedad y cenizas

### **3.2. MODELO DE SIMULACIÓN CON ASPEN PLUS**

#### **3.2.1. Justificación**

El modelo propuesto se ha desarrollado empleando el *software* comercial Aspen Plus. Esta herramienta se ha utilizado ampliamente para modelar operaciones de conversión termoquímica de combustibles sintéticos, como es el caso del proceso de gasificación de lodos. Este programa de simulación posee un amplio banco de datos de propiedades físicas y se ha elegido por su flexibilidad y su fácil manejo de sólidos (Puig-Arnau et al., 2010).

Se trata de un modelo adimensional de equilibrio termodinámico en estado estacionario. Los modelos de equilibrio se basan en la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema, lo que significa que las especies involucradas se encuentran en su estado más estable cuando todas las reacciones químicas han alcanzado el equilibrio. Estos modelos son los más adecuados para el objetivo buscado en este proyecto, ya que son capaces de evaluar con fiabilidad la eficiencia del proceso de gasificación y son los más utilizados para el estudio preliminar de la influencia de las variables de funcionamiento (Ngo et al., 2011).

En el modelo propuesto, el sistema es adimensional y el proceso se encuentra en estado estacionario. Esto quiere decir que no se considera ninguna distribución espacial ni variación temporal de los parámetros y propiedades del sistema. Los modelos adimensionales son herramientas útiles para calcular la composición del gas final y su valor energético. Además, el enfoque estacionario permite evaluar el efecto de las propiedades físicas, químicas y energéticas de la biomasa, proporcionando una alta precisión en el cálculo integrado de todo el proceso al necesitar un tiempo computacional pequeño (Tinaud et al., 2008).

#### **3.2.2. Hipótesis**

Los supuestos generales sobre los que se asienta el modelo son:

- Operación en condiciones de estado estacionario (Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2008; Mitta et al., 2011; Ramzan et al., 2011; Beheshti et al., 2015).
- Reactor isoterma, es decir, temperatura uniforme en el lecho (Ramzan et al., 2011; Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2008).
- Mezcla perfecta en el gasificador (Mitta et al., 2011; Doherty et al., 2008).
- Modelo adimensional de equilibrio (Mitta et al., 2011; Doherty et al., 2013).
- Gases ideales (Doherty et al., 2013).
- Operación a presión atmosférica (Doherty et al., 2013; Nikoo y Mahinpey, 2008).
- No se tienen en cuenta las caídas de presión en los equipos (Doherty et al., 2013).
- Secado y pirólisis instantáneas (Sotudeh-Gharebaagh et al., 1998; Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2008).
- El residuo no gasificado (*char*) está formado por carbono y cenizas (Nikoo y Mahinpey, 2008; Beheshti et al., 2015).
- Todo el contenido de azufre del lodo se convierte en  $H_2S$  (Ramzan et al., 2011; Mitta et al., 2011; Doherty et al., 2008; Schuster et al., 2001).
- Todo el contenido de nitrógeno del lodo se convierte en  $NH_3$  (Ramzan et al., 2011; Mitta et al., 2011; Doherty et al., 2008; Schuster et al., 2001).
- No hay pérdidas de calor en el reactor, el cual está perfectamente aislado (Doherty et al., 2013; Beheshti et al., 2015).

- El nitrógeno procedente del aire es inerte durante todo el proceso.
- El alquitrán no se modela (Ramzan et al., 2011; Mitta et al., 2011; Doherty et al., 2008).
- El único hidrocarburo considerado en el gas de síntesis es el metano (Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2008).

Aunque el número de trabajos es limitado, algunos investigadores (Ramzan et al., 2011; Nikoo y Mahinpey, 2008; Mitta et al., 2006; Doherty et al., 2008; Pliego-Bravo et al., 2014; Beheshti et al., 2015) han desarrollado modelos de simulación para el proceso de gasificación de distintos tipos de biomasa en reactores de lecho fluidizado, asumiendo la operación en estado estacionario. En este tipo de gasificadores se dan condiciones uniformes a lo largo del reactor (hipótesis de modelo adimensional), fácil control de la temperatura (supuesto de reactor isoterma) y buen contacto gas/sólido (hipótesis de mezcla perfecta entre el combustible y el agente gasificante), lo que permite una eficaz transferencia de calor (Campoy, 2009).

Se ha empleado un enfoque global de equilibrio para dejar de lado la complejidad de la hidrodinámica del gasificador (Mitta et al., 2006). Asimismo, se asume la especificación de una aproximación de temperaturas para un número limitado de reacciones químicas con el fin de estimar la composición y el poder calorífico del gas de salida. Este método de equilibrio restringido permite validar el modelo con datos reales y examinar la influencia de los principales parámetros de funcionamiento sobre la eficiencia del proceso de gasificación (Doherty et al., 2008).

En el proceso de gasificación, el tiempo requerido para las etapas de secado y desvolatilización de la biomasa es muy corto, por lo que en la simulación se consideran operaciones instantáneas, una vez que el lodo entra en el lecho (Sotudeh-Gharebaagh et al., 1998; Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2008).

El metano es el único hidrocarburo que se ha tenido en cuenta en el modelado del proceso. De esta manera, los alquitranes y otros productos pesados formados durante la desvolatilización y gasificación del lodo no se han considerado con el fin de simplificar el modelo (Ramzan et al., 2011; Mitta et al., 2006).

Por último, se ha asumido que todo el nitrógeno del lodo se convierte en amoníaco, sin que se produzcan óxidos de nitrógeno durante el proceso. Esto se explica por las condiciones de atmósfera reductora de la gasificación. Por esta misma razón, se considera que todo el azufre del lodo se transforma en ácido sulfhídrico. Esta simplificación no produce una inexactitud significativa, debido al bajo contenido de azufre en el lodo (Schuster et al., 2001).

#### **3.2.3. Datos de partida**

- Condiciones de operación

El modelo se ha elaborado bajo las condiciones de funcionamiento de la planta a escala de laboratorio correspondientes al ensayo número 1 (Tabla 3.5), en el que se emplea únicamente aire como agente gasificante. Las variables quedan fijadas en los siguientes valores:

Temperatura final de gasificación:  $T = 800^{\circ}\text{C}$

Ratio equivalente:  $ER = 0,3$

Ratio vapor/biomasa:  $S/B = 0$

El gasificador trabaja a presión atmosférica e inicialmente se encuentra a temperatura ambiente.

- Corriente de aire alimentado

Para el diseño del modelo, se mantiene el caudal de aire utilizado durante los ensayos de gasificación. Caudal de entrada de aire:  $Q_{\text{aire}} = 1,28 \text{ NL/min}$ .

El aire entrante se ha precalentado a  $450^{\circ}\text{C}$ . La composición (en volumen) del aire se ha simplificado a 79%  $\text{N}_2$  y 21%  $\text{O}_2$ .

- Corriente de alimentación de los lodos

Se ha utilizado el flujo de entrada de lodos del experimento número 1 (Tabla 3.5). Como se ha comentado anteriormente, este caudal de lodos se ha calculado tras fijar el flujo de aire para asegurar que la velocidad de entrada del mismo en el gasificador sea aproximadamente 4 veces la velocidad mínima de fluidización y, al mismo tiempo, conseguir trabajar bajo un *ratio* equivalente de valor 0,3. Caudal de entrada de lodos:  $Q_{\text{lodos}} = 1,44 \text{ g/min}$ .

La composición del lodo se ha obtenido de los análisis proximal y elemental realizados en las pruebas de caracterización físico-química (Tabla 3.1).

El carbono fijo, que no se degrada ni reacciona durante el proceso de gasificación del lodo seco, corresponde aproximadamente al 10% del total de dicho elemento en la composición inicial, según determinaciones experimentales realizadas en el laboratorio y otros datos bibliográficos (Nilsson, 2012). Carbono fijo: 10% del carbono total del lodo (en masa).

El poder calorífico inferior (PCI) del lodo determinado en dichos ensayos también debe ser introducido como dato inicial en el modelo.  $\text{PCI lodo} = 11338,9 \text{ kJ/kg}$ .

#### **3.2.4. Descripción del modelo**

Para trabajar con el *software* de procesos químicos Aspen Plus en su forma modular-secuencial (SM), se construye un diagrama de flujo colocando en la ventana de simulación los bloques estándar que representan las principales unidades de operación del proceso (reactores, separadores, mezcladores, etc.). Estos bloques se unen mediante flujos de masa y energía. Especificando las condiciones iniciales, los caudales y la composición de las corrientes de entrada, así como los parámetros de funcionamiento de cada módulo, el programa es capaz de resolver el sistema de forma secuencial gracias a su extensa base de datos para el cálculo de las propiedades físicas y a los balances de materia y energía establecidos en cada bloque (Porrazo et al., 2014).

En la Figura 3.4 se muestra el esquema del procedimiento de cálculo de la simulación con Aspen Plus y en la Figura 3.5 se presenta el diagrama de flujo del modelo del proceso de gasificación de lodos.

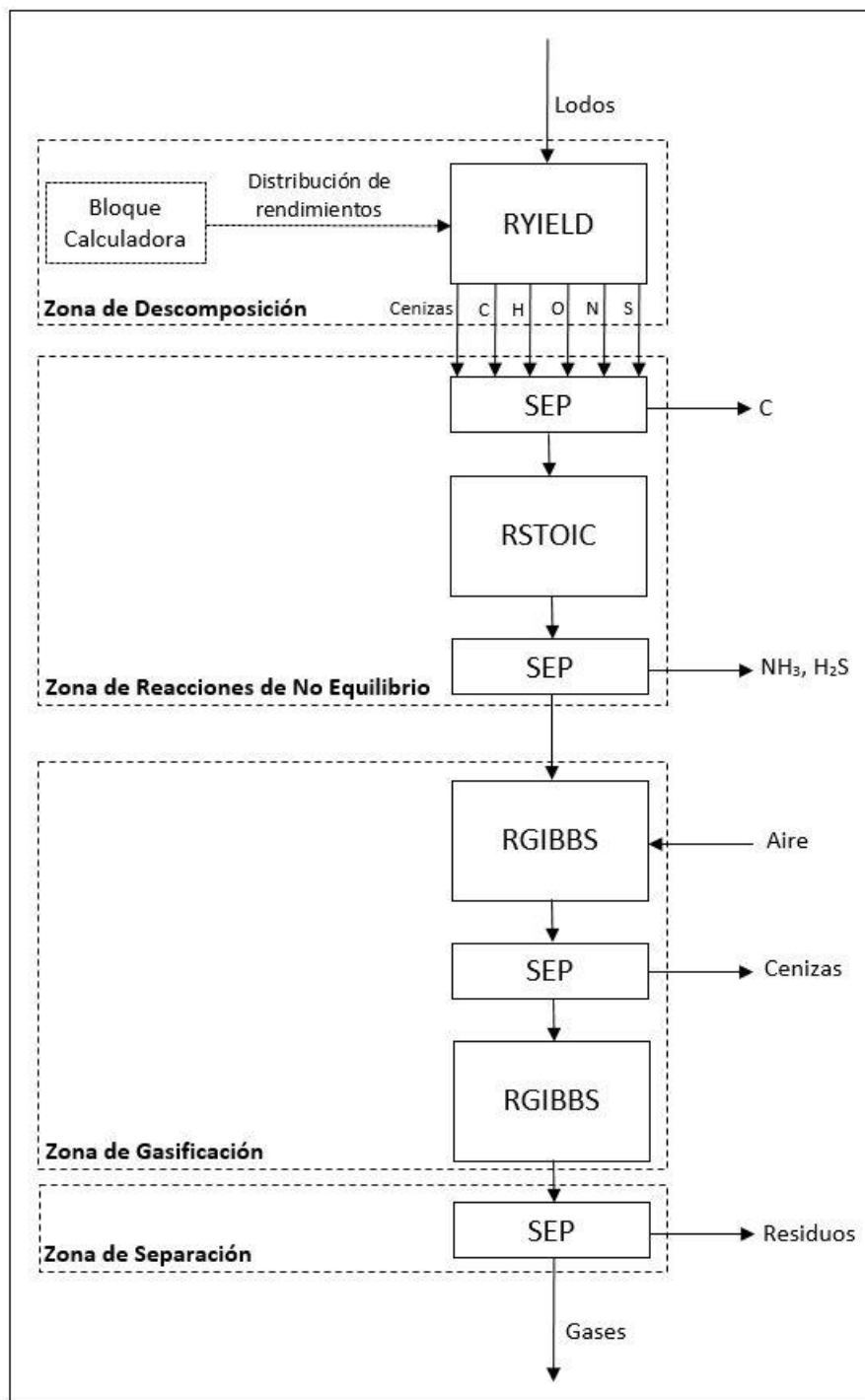


Figura 3.4. Procedimiento de cálculo con Aspen Plus. Fuente: Elaboración propia



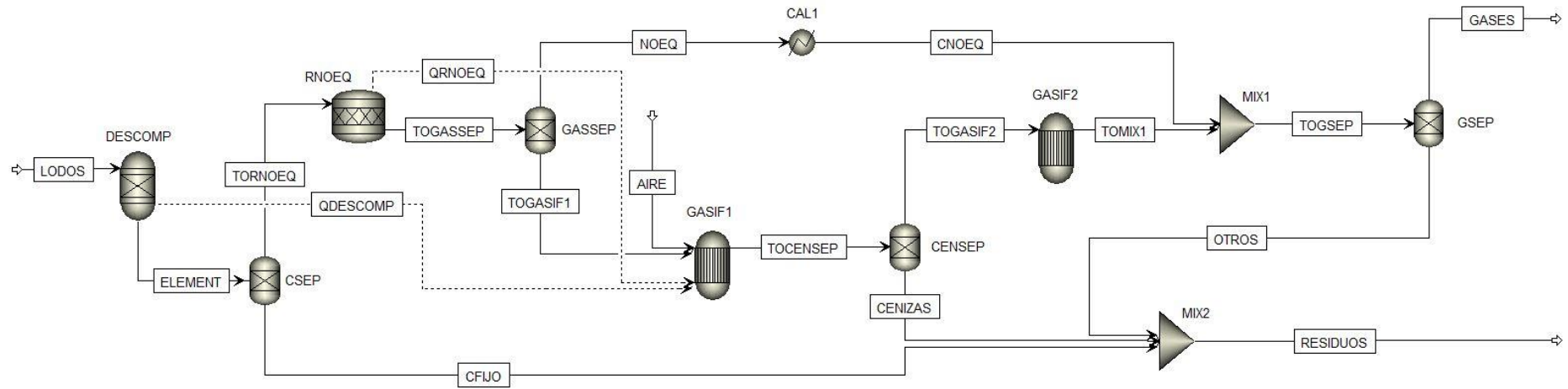


Figura 3.5. Diagrama de flujo del modelo de simulación con Aspen Plus. Fuente: Elaboración propia

Para la construcción del modelo, el proceso de gasificación de lodos se ha dividido en varias etapas.

#### a) Zona de descomposición

La corriente de alimentación “LODOS” se encuentra a presión atmosférica y a temperatura ambiente ( $P = 1 \text{ atm}$ ;  $T = 25^\circ\text{C}$ ). Este flujo está caracterizado por el componente no convencional “LODO”, definido previamente por el usuario. Esta corriente se introduce en un bloque “RYield” llamado “DESCOMP”. Este tipo de módulo sirve para simular reactores en los que la distribución de rendimientos de los productos es conocida y no se requiere ni la estequiometría ni la cinética de las reacciones.

Esta fase de descomposición simula la etapa de pirólisis o desvolatilización de la biomasa. En ella, la alimentación no convencional de lodos es transformada en una corriente formada por los elementos convencionales equivalentes, dada una distribución de rendimientos (Mitta et al., 2006).

Se asume la hipótesis de que el rendimiento total de volátiles es igual al contenido de volátiles del combustible matriz determinado por su análisis elemental (Ramzan et al., 2011). El rendimiento para el agua viene dado por el contenido de humedad de la biomasa, determinado por su análisis proximal. Dado el bajo contenido en humedad de los lodos, no se necesita un bloque específico para la etapa de secado (Nikoo y Mahinpey, 2008).

De esta manera, la distribución de rendimientos se ajusta en el módulo “RYield” mediante un bloque calculadora que se configura importando la composición másica total (en base húmeda) de la alimentación.

El flujo de salida del reactor contiene los componentes  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , S, C y “CENIZA”, sustancia no convencional a la que se asigna los atributos de composición correspondientes en dicho módulo. Esta corriente se denomina “ELEMENT” y su entalpía no coincide con la del flujo de alimentación “LODOS”, ya que la suma de las entalpías de los elementos individuales de un combustible no es igual a la entalpía inicial del mismo debido a que no se han considerado los enlaces químicos (Doherty et al., 2009). Por ello, se ha insertado el flujo de calor “QDESCOMP”, que incorpora de nuevo la entalpía perdida en el sistema.

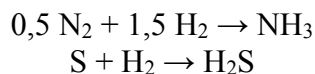
La temperatura y la presión de la zona de descomposición se establece en los valores de la etapa de gasificación ( $P = 1 \text{ atm}$ ;  $T = 800^\circ\text{C}$ ).

#### b) Zona de reacciones químicas que no están en estado de equilibrio

La corriente de salida del “RYield” entra en un bloque “Sep2” llamado “CSEP” que separa en el flujo “CFIJO” la cantidad de carbono del lodo que no participa en las reacciones de gasificación (10% en masa del carbono inicial).

La otra corriente que sale del separador contiene el resto del carbono y los demás componentes. Este flujo se introduce en un bloque “RStoic” llamado “RNOEQ”. Este tipo de módulo simula un reactor estequiométrico en el que la conversión y la estequiometría de las reacciones son conocidas, mientras que la cinética es poco importante.

Se ha supuesto que todo el nitrógeno y el azufre contenidos en el lodo se transforman en amoníaco y ácido sulfhídrico, respectivamente. El bloque “RNOEQ” sirve para simular estas reacciones, con una conversión total para el N<sub>2</sub> y el S.



Este reactor también trabaja a la presión y temperatura de la etapa de gasificación (P = 1 atm; T = 800°C). La variación de entalpía producida en el bloque “RStoic” se indica con el flujo de calor “QRNOEQ”, el cual se alimenta al gasificador.

La corriente de salida de este módulo “RNOEQ” se introduce en un segundo separador “Sep2” denominado “GASSEP”, que desvía todo el amoníaco y el ácido sulfhídrico producidos en el flujo “NOEQ”. Esta corriente debe llevarse a la temperatura de gasificación (T = 800°C) mediante un bloque calentador “Heater” llamado “CAL1”, antes de mezclarse con el gas final.

#### c) Zona de gasificación

La otra corriente que sale del separador “GASSEP” entra junto con el caudal de aire especificado en un primer módulo “RGibbs” llamado “GASIF1”, donde se producen todas las reacciones de oxidación parcial y gasificación. Este tipo de bloque modela reacciones que alcanzan el estado de equilibrio mediante la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema, sin necesidad de especificar la estequiometría de las mismas.

Este reactor “GASIF1” trabaja a presión atmosférica y no requiere establecer la temperatura de operación, pues viene dada por los flujos de calor “QDESCOMP” y “QRNOEQ”. Así, las reacciones exotérmicas de combustión que ocurren dentro del gasificador proporcionan la energía necesaria para que se produzcan el resto de reacciones endotérmicas del sistema (Campoy, 2009).

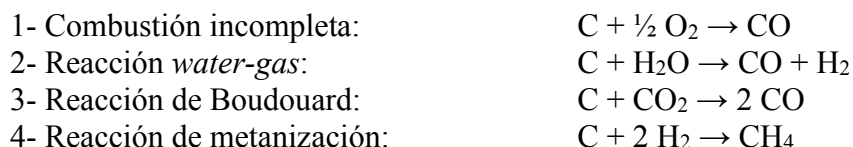
El flujo de salida del primer gasificador entra en un bloque “Sep2” denominado “CENSEP”, que separa las cenizas del resto del gas en la corriente “CENIZAS”. La corriente gaseosa que sale de “CENSEP” se alimenta a un segundo bloque “RGibbs” llamado “GASIF2”. En este reactor se han fijado tanto la presión como la temperatura de gasificación (P = 1 atm; T = 800°C). De acuerdo con las hipótesis del modelo, en “GASIF1” y “GASIF2” se ha definido el nitrógeno procedente del aire como componente inerte que no reacciona.

En el reactor “GASIF2” se ha establecido un equilibrio restringido mediante la especificación de una aproximación de temperatura de gasificación distinta para cada reacción individual. Este método ha sido ampliamente utilizado por varios investigadores (Mitta et al., 2006; Doherty et al. 2008) y permite modificar el equilibrio de cada reacción para que el modelo sea capaz de realizar estimaciones realistas (Doherty et al., 2009).

Para obtener las especificaciones de la aproximación de la temperatura en cada reacción, el bloque “RGibbs” evalúa la constante de equilibrio químico en T + ΔT, donde T es la temperatura real del reactor (especificada o calculada) y ΔT es la aproximación de la temperatura.

El número de reacciones del sistema debe ser igual al número de especies que intervienen menos el número de átomos involucrados. Dentro del segundo gasificador participan ocho componentes (C, O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub> y N<sub>2</sub>) que presentan cuatro átomos distintos (C, O, H y N). Por tanto, se han tenido en cuenta cuatro reacciones químicas en el bloque “GASIF2”.

Las reacciones deben ser linealmente independientes, por lo que solamente se han definido en el gasificador las cuatro reacciones más importantes del proceso que cumplen esta condición. Cuando el agente gasificante es el aire, estas reacciones son la combustión incompleta, la reacción *water-gas*, la de Boudouard y la de metanización.



La corriente que sale del gasificador “GASIF2” se mezcla en el bloque “MIX1” con el flujo “CNOEQ” que contiene amoníaco y ácido sulfhídrico.

#### d) Zona de separación

El flujo saliente de “MIX1” se introduce en el bloque “Sep2” llamado “GSEP”. Este módulo separa el carbono sólido que ha quedado en el gasificador (corriente “OTROS”) del gas final formado. Esta corriente de salida “GASES” constituye el gas producto del proceso de gasificación modelado.

Finalmente, la corriente “CENIZAS” que sale de “CENSEP” se mezcla con el carbono fijo sin reaccionar del flujo “CFIJO” y con el flujo “OTROS” en el bloque “MIX2”. La corriente resultante “RESIDUOS” se retira, ya que constituye el residuo sólido del proceso de gasificación.

#### **3.2.5. Diseño del modelo de simulación**

El desarrollo de un modelo en Aspen Plus incluye los siguientes pasos (Doherty et al., 2008):

- Fijar la clase de corriente y seleccionar el método de propiedades físicas.
- Especificar los componentes del sistema (de la base de datos).
- Construir el diagrama de flujo del proceso (bloques de operación de la unidad y conexión entre flujos de materia y energía).
- Especificar las corrientes de alimentación (temperatura, presión, composición y caudal).
- Definir los bloques de cada unidad de operación (temperatura, presión, reacciones químicas, etc.).

#### Inicio

Tras abrir el programa Aspen Plus v8.6, se selecciona una nueva plantilla de simulación predefinida por el *software* que permite trabajar con sólidos.

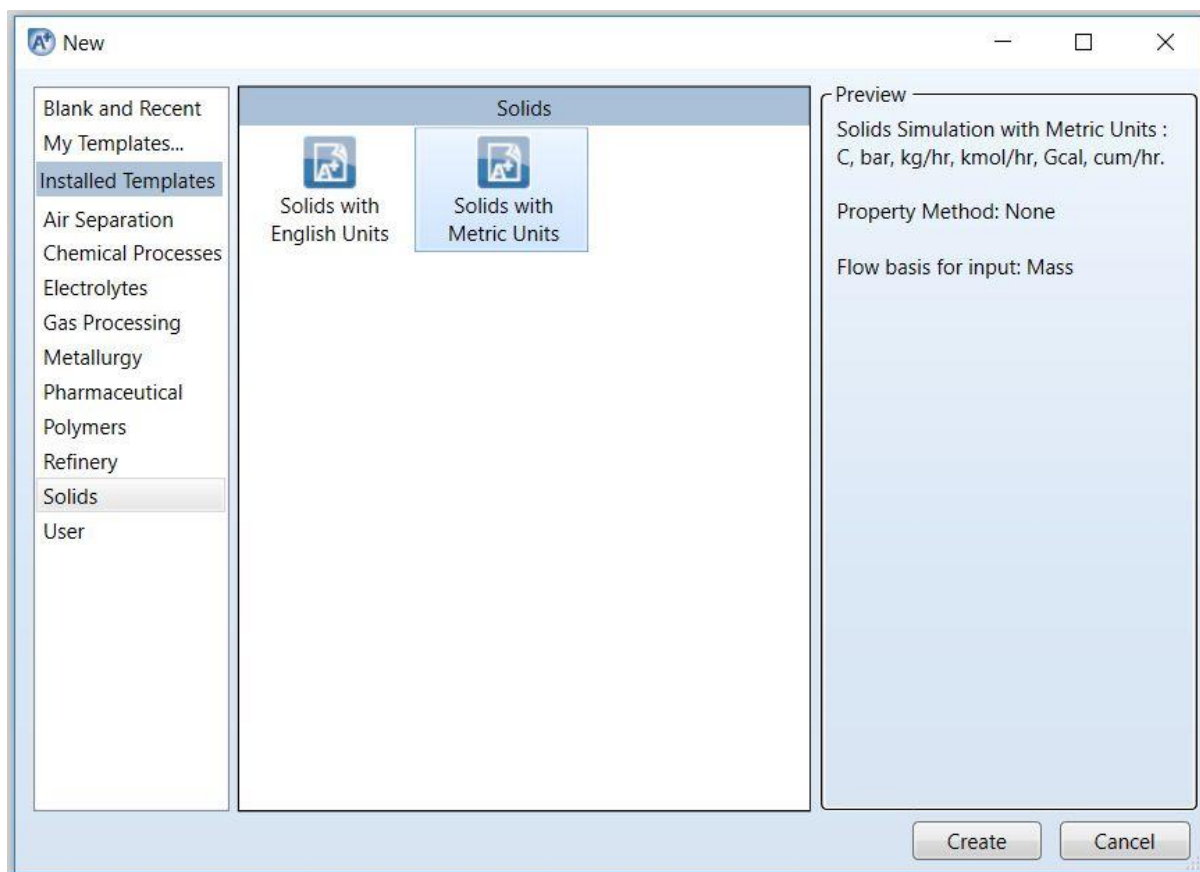


Figura 3.6. Plantillas de simulación instaladas. Fuente: Aspen Plus v8.6

### Características globales

El siguiente paso consiste en configurar las características generales del simulador: título, sistema de unidades, tipo de corriente, etc.



Figura 3.7. Características globales. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Sistema de unidades: Se selecciona el Sistema Métrico de Ingeniería (MET – *Metric Engineering System*) como sistema de unidades que emplea por defecto el simulador para las variables (Tabla 3.6).

Tabla 3.6. Unidades de las variables del sistema MET. Fuente: Aspen Plus v8.6

Variables	Unidades
Temperatura	°C
Presión	bar
Flujos Másicos	kg/h
Flujos Molares	kmol/h
Flujos Volumétricos	m <sup>3</sup> /h
Flujos de Energía	Gcal

Tipo de corriente: Para trabajar con sólidos en Aspen Plus, es necesario definir la clase de corriente (*Stream Class*) que se va a utilizar en las simulaciones, de acuerdo con la estructura interna de los componentes participantes.

En este caso, se elige el tipo de corriente MIXCINC porque en el sistema están presentes tanto sólidos convencionales como sólidos no convencionales, sin especificar la distribución del tamaño de partícula. Se ha supuesto que todas las partículas de los sólidos involucrados en el proceso son esféricas y de tamaño uniforme, por lo que no existe ninguna distribución del tamaño de partícula (Nikoo y Mahinpey, 2008).

En esta clase de flujo se incluye la subcorriente MIXED, en la cual todos los componentes participan en su fase de equilibrio. Para manejar los componentes sólidos, también contiene las corrientes parciales CISOLID y NC. La subcorriente CISOLID (*Conventional Inert Solid*) se utiliza para sólidos homogéneos que tienen un peso molecular predefinido en la base de datos del *software* de simulación. La subcorriente NC (*Nonconventional*) se emplea para sólidos heterogéneos cuyo peso molecular no se encuentra preestablecido en el sistema.

Use this stream class	When
CONVEN	The simulation does not involve solids, or the only solids are electrolytes salts.
MIXCISLD	Conventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXNC	Nonconventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXCINC	Both conventional and nonconventional solids are present, but there is no particle size distribution.
MIXCIPSD	Conventional solids are present, with a particle size distribution.
MIXNCPSD	Nonconventional solids are present, with a particle size distribution.

Figura 3.8. Tipos de corrientes. Fuente: Aspen Plus v8.6

### Componentes

A continuación se seleccionan los componentes que se van a utilizar en la simulación: H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S, NH<sub>3</sub>, S, C, LODO y CENIZA.

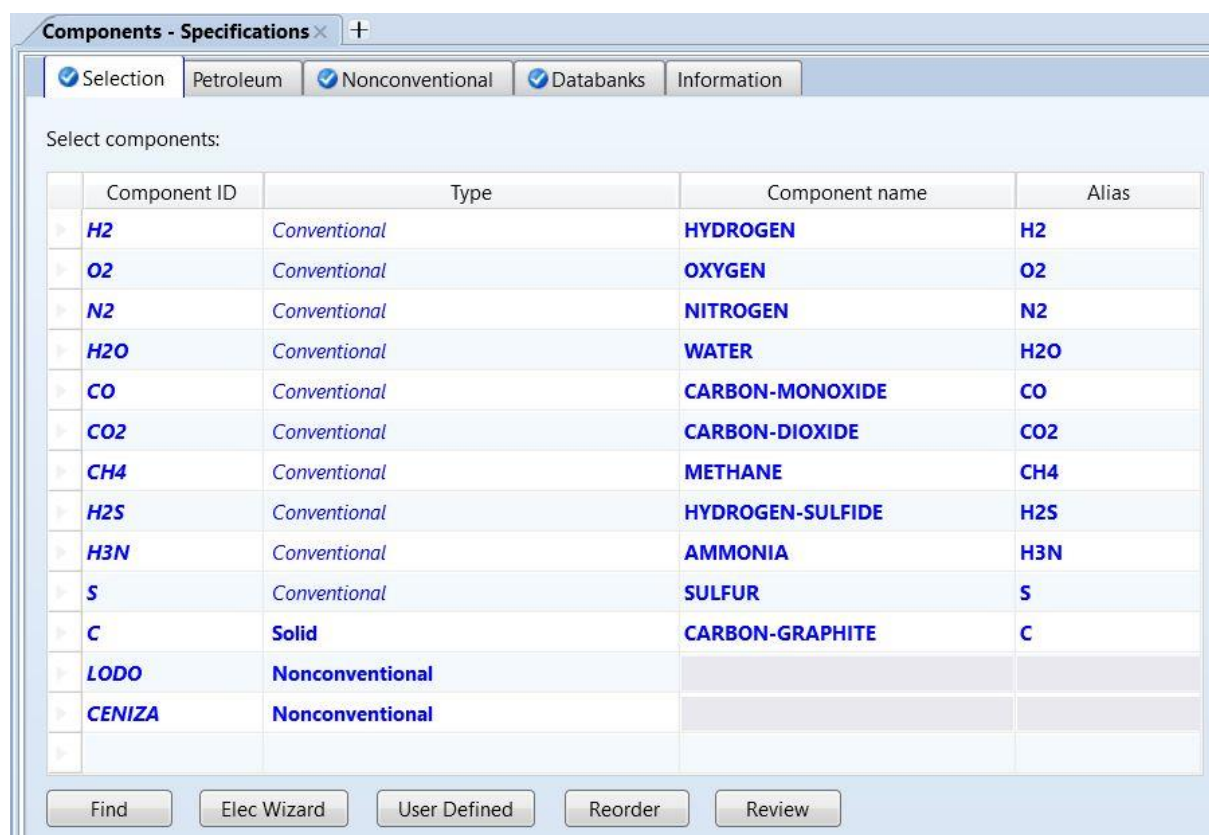


Figura 3.9. Componentes. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Los elementos convencionales (*Conventional*) están presentes en el banco de datos del simulador y aparece su nombre en el campo correspondiente de forma automática. Este es el caso del hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, agua, monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano, ácido sulfhídrico, amoníaco y azufre.

El carbono se define de tipo sólido (*Solid*) porque puede aparecer como inerte a lo largo del proceso de gasificación en la subcorriente CISOLID.

Los componentes sólidos no convencionales (*Nonconventional*) son el LODO y la CENIZA, cuyas propiedades se especifican por el usuario más adelante. Son sólidos heterogéneos que no pueden participar en las reacciones químicas ni en las fases de equilibrio.

### Método de propiedades físicas

Existen numerosos métodos termodinámicos en Aspen Plus para calcular las propiedades físicas de los componentes, tales como la entalpía y la densidad.

La ecuación de Peng-Robinson con la modificación de la función alfa de Boston-Mathias se utiliza para estimar todas las propiedades físicas de los componentes convencionales en el proceso de gasificación (Doherty et al., 2013).

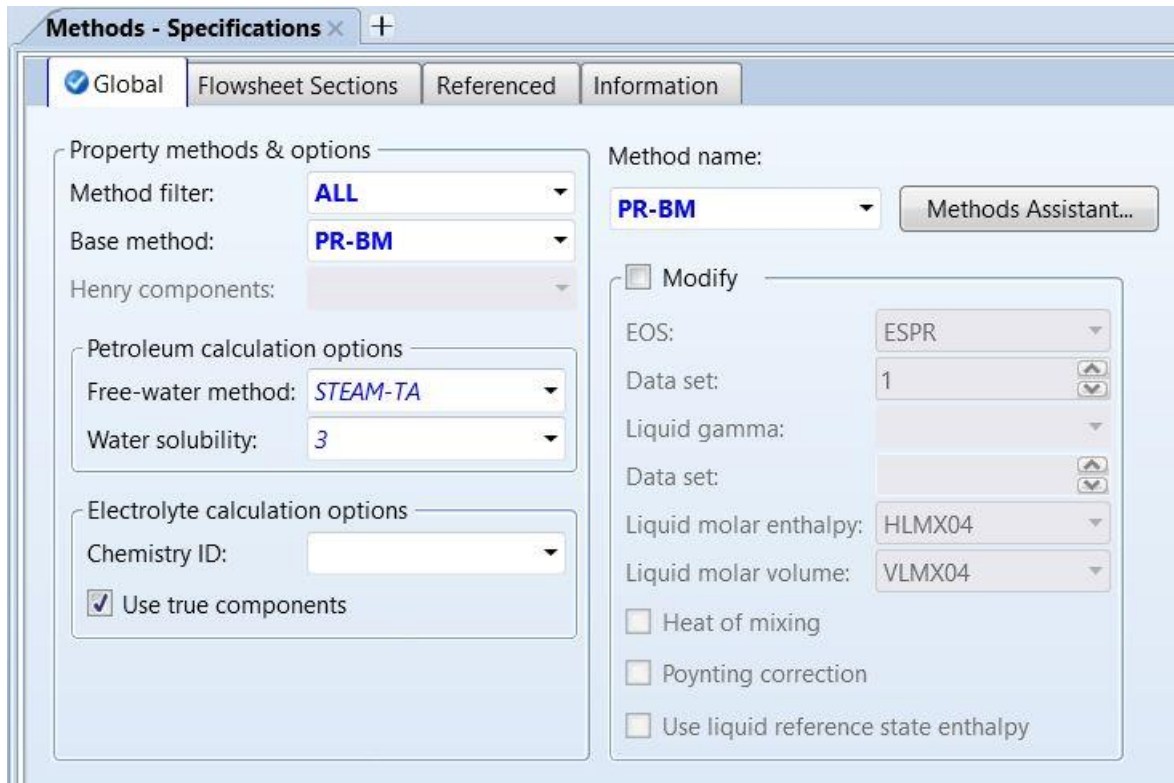


Figura 3.10. Método de propiedades físicas. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

En este paquete de propiedades, el parámetro alfa es una variable dependiente de la temperatura. Esta función mejora la correlación de la presión de vapor del componente puro cuando la temperatura es muy alta. Por esta razón, este método es apto para el proceso de gasificación, donde la temperatura de operación es elevada (Ramzan et al., 2011).

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b) + b(V_m - b)}$$

$b$	$= \sum_i x_i b_i$
$a$	$= a_0 + a_1$
$a_0$	$= \sum_i \sum_j x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij})$ (the standard quadratic mixing term, where $k_{ij}$ has been made temperature-dependent)
$k_{ij}$	$= \frac{k_{ij}^{(1)} + k_{ij}^{(2)}T + k_{ij}^{(3)}T^2}{T}$ $k_{ij} = k_{ji}$
$a_1$	$= \sum_{i=1}^n x_i \left( \sum_{j=1}^n x_j ((a_i a_j)^{1/2} l_{i,j})^{1/3} \right)^3$ (an additional, asymmetric term used to model highly non-linear systems)
$l_{ij}$	$= \frac{l_{ij}^{(1)} + l_{ij}^{(2)}T + l_{ij}^{(3)}T^2}{T}$ In general, $l_{ij} \neq l_{ji}$ .
$a_i$	$= fcn(T, T_a, p_a, \omega_i)$
$b_i$	$= fcn(T_a, p_a)$

Figura 3.11. Ecuación y parámetros del método de propiedades PR-BM. Fuente: Aspen Plus v8.6



### Modelos de propiedades físicas de los sólidos no convencionales

Las únicas propiedades físicas que el *software* puede calcular para los componentes no convencionales son la entalpía y la densidad. Los resultados de los análisis proximal, elemental y sulfanal de dichos componentes se utilizan para determinar dichas propiedades.

Para el caso de los componentes no convencionales del sistema (LODO y CENIZA), se han seleccionado los modelos HCOALGEN y DCOALIGT para la determinación de la entalpía y la densidad, respectivamente (Ramzan et al., 2011; Doherty et al., 2008).

El modelo DCOALIGT para el cálculo de la densidad utiliza la correlación del IGT (*Institute of Gas Technology*).

$$\rho_i = \frac{\rho_i^{dm}}{\left[ \rho_i^{dm} (0.42w_{A,i}^d - 0.15w_{Sp,i}^d) + 1 - 1.13w_{A,i}^d - 0.5475w_{Sp,i}^d \right]}$$

$$\rho_i^{dm} = \frac{1}{\alpha_{1i} + \alpha_{2i}w_{H,i}^{dm} + \alpha_{3i}(w_{H,i}^{dm})^2 + \alpha_{4i}(w_{H,i}^{dm})^3}$$

$$w_{H,i}^{dm} = \frac{10^2(W_{H,i}^d - 0.013w_{A,i}^d + 0.02w_{Sp,i}^d)}{(1 - 1.13w_{A,i}^d - 0.475w_{Sp,i}^d)}$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
DENIGT/1	$a_{1i}$	0.4397
DENIGT/2	$a_{2i}$	0.1223
DENIGT/3	$a_{3i}$	-0.01715
DENIGT/4	$a_{4i}$	0.001077

Figura 3.12. Correlaciones del modelo de densidad DCOALIGT. Fuente: Aspen Plus v8.6

El modelo HCOALGEN para el cálculo de la entalpía incluye un gran número de correlaciones. El usuario puede elegir entre cuatro códigos de opciones diferentes. Estos cuatro códigos definen cómo el modelo calcula el calor de combustión, el calor de formación estándar, la capacidad calorífica y la entalpía base de los sólidos no convencionales.

### 3. METODOLOGÍA

$$\Delta_c h_i^d = (1 - w_{MOA}) \Delta_c h_i^{dm} + 5400 w_{pyj}$$

Boie Correlation:

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{S,i}^{dm} + a_{4i} w_{O,i}^{dm} + a_{5i} w_{N,i}^{dm} \right] 10^2 + a_{6i}$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
BOIEC/1	$a_{1i}$	151.2
BOIEC/2	$a_{2i}$	499.77
BOIEC/3	$a_{3i}$	45.0
BOIEC/4	$a_{4i}$	-47.7
BOIEC/5	$a_{5i}$	27.0
BOIEC/6	$a_{6i}$	-189.0

Dulong Correlation:

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{S,i}^{dm} + a_{4i} w_{O,i}^{dm} + a_{5i} w_{N,i}^{dm} \right] 10^2 + a_{6i}$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
DLNGC/1	$a_{1i}$	145.44
DLNGC/2	$a_{2i}$	620.28
DLNGC/3	$a_{3i}$	40.5
DLNGC/4	$a_{4i}$	-77.54
DLNGC/5	$a_{5i}$	-16.0

Grummel and Davis Correlation:

$$\Delta_c h_i^{dm} = \frac{(a_{5i} + a_{2i} w_{H,i}^{dm})}{(1 - w_{A,i}^d)} (a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{S,i}^{dm} + a_{4i} w_{O,i}^{dm}) 10^2 + a_{6i}$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
GMLDC/1	$a_{1i}$	0.3333
GMLDC/2	$a_{2i}$	654.3
GMLDC/3	$a_{3i}$	0.125
GMLDC/4	$a_{4i}$	0.125
GMLDC/5	$a_{5i}$	424.62
GMLDC/6	$a_{6i}$	-2.0

Mott and Spooner Correlation:

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{S,i}^{dm} - a_{4i} w_{O,i}^{dm} \right] 10^2 + a_{7i} \quad \text{for } w_{O,i}^{dm} \leq 0.15$$

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{S,i}^{dm} - \left( a_{6i} \frac{a_{5i} w_{O,i}^{dm}}{1 - w_{A,i}^d} \right) w_{O,i}^{dm} \right] 10^2 + a_{7i} \quad \text{for } w_{O,i}^{dm} > 0.15$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
MTSPC/1	$a_{1i}$	144.54
MTSPC/2	$a_{2i}$	610.2
MTSPC/3	$a_{3i}$	40.3
MTSPC/4	$a_{4i}$	62.45
MTSPC/5	$a_{5i}$	30.96
MTSPC/6	$a_{6i}$	65.88
MTSPC/7	$a_{7i}$	-47.0

IGT Correlation:

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^d + a_{2i} w_{H,i}^d + a_{3i} w_{S,i}^d + a_{4i} w_{A,i}^d \right] 10^2 + a_{5i}$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
CIGTC/1	$a_{1i}$	178.11
CIGTC/2	$a_{2i}$	620.31
CIGTC/3	$a_{3i}$	80.93
CIGTC/4	$a_{4i}$	44.95
CIGTC/5	$a_{5i}$	-5153.0

Revised IGT Correlation (Perry's, 7th ed., equation 27-7):

$$\Delta_c h_i^{dm} = \left[ a_{1i} w_{C,i}^d + a_{2i} w_{H,i}^d + a_{3i} w_{S,i}^d + a_{4i} w_{A,i}^d + a_{5i} (w_{O,i}^d + w_{N,i}^d) \right] 10^2$$

Parameter Name/Element	Symbol	Default
CIGT2/1	$a_{1i}$	146.58
CIGT2/2	$a_{2i}$	568.78
CIGT2/3	$a_{3i}$	29.4
CIGT2/4	$a_{4i}$	-6.58
CIGT2/5	$a_{5i}$	-51.53

#### User Input Value of Heat Combustion

Parameter Name/Element	Symbol	Default
HCOMB	$\Delta_c h_i^d$	0

#### HCOALGEN Option Codes

Option Code Number	Option Code Value <sup>†</sup>	Calculation Method	Parameter Names	Component Attributes
<b>1 Heat of Combustion</b>				
1		Boie correlation	BOIEC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
2		Dulong correlation	DLNGC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
3		Grummel and Davis correlation	GMLDC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
4		Mott and Spooner correlation	MTSPC	ULTANAL SULFANAL PROXANAL
5		IGT correlation	CIGTC	ULTANAL PROXANAL
6		User input value	HCOMB	ULTANAL PROXANAL
7		Revised IGT correlation	CIGT2	ULTANAL PROXANAL
<b>2 Standard Heat of Formation</b>				
1		Heat-of-combustion-based correlation	—	ULTANAL SULFANAL
2		Direct correlation	HFC	ULTANAL SULFANAL COALMISC
<b>3 Heat Capacity</b>				
1		Kirov correlation	CP1C	PROXANAL
2		Cubic temperature equation	CP2C	—
<b>4 Enthalpy Basis</b>				
1		Elements in their standard states at 298.15K and 1 atm	—	—
2		Component at 298.15 K	—	—

<sup>†</sup> Default = 1 for each option code

Figura 3.13. Correlaciones y códigos de opciones del modelo de entalpía HCOALGEN. Fuente: Aspen Plus v8.6

Para el componente no convencional LODO se ha establecido el código 6-1-1-1, que permite al usuario especificar su calor de combustión.

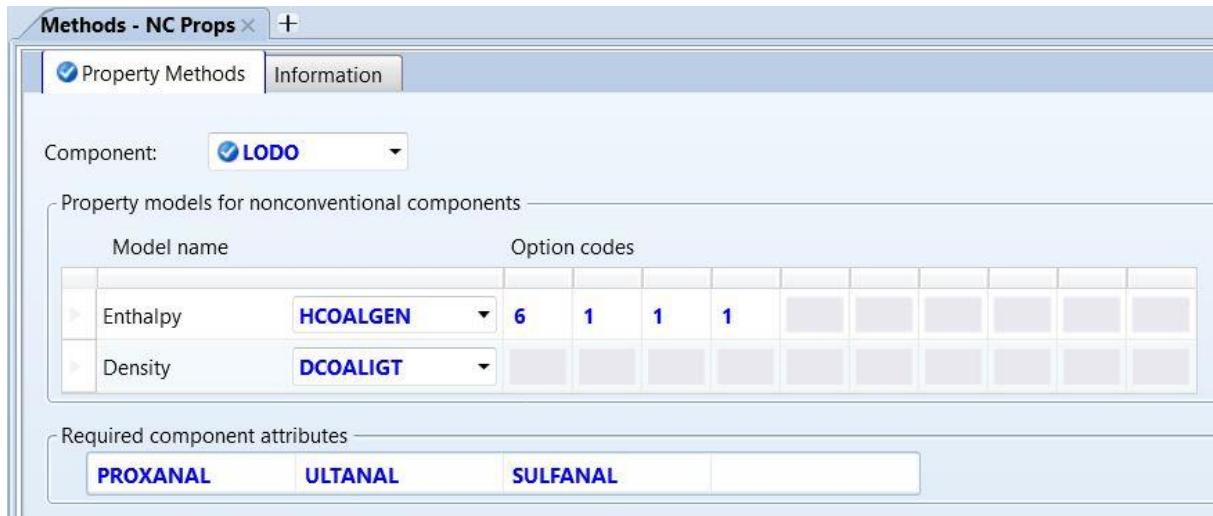


Figura 3.14. Modelo de propiedades del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

El HCOMB es el calor de combustión del lodo en base seca, lo cual coincide con su poder calorífico inferior (PCI lodo = 11338,9 kJ/kg).

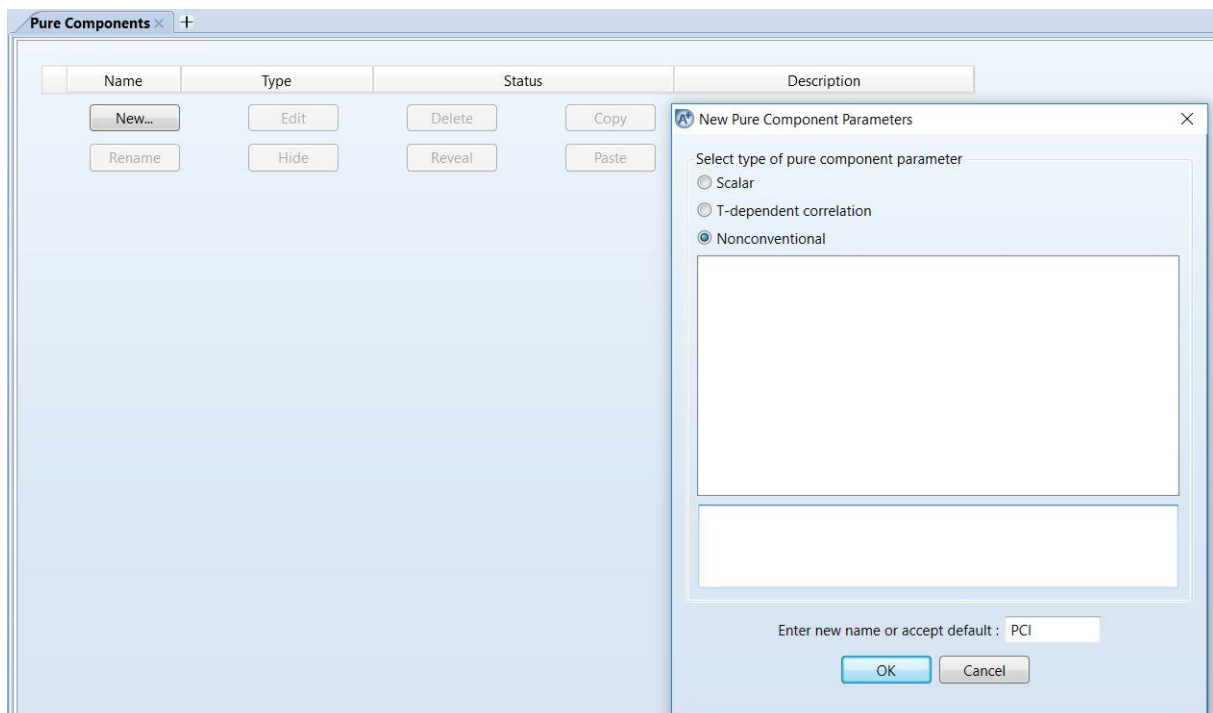


Figura 3.15. Definición de HCOMB como PCI del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



Figura 3.16. Poder calorífico del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Para el componente no convencional CENIZA se ha establecido el código 1-1-1-1, el cual viene dado por defecto en el programa.

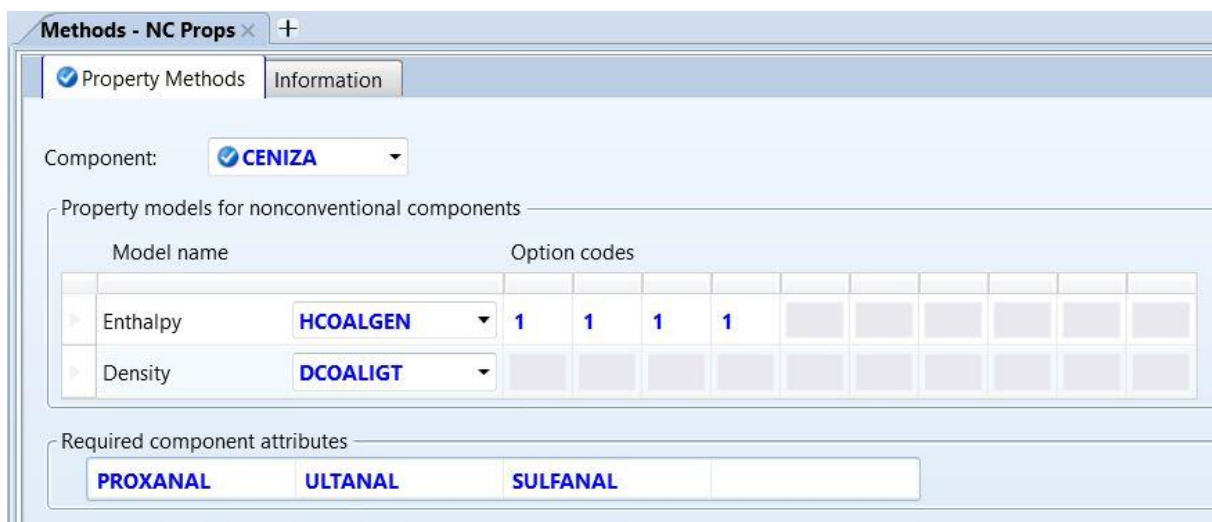


Figura 3.17. Modelo de propiedades de la ceniza. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

La correcta representación de las propiedades físicas del sistema es un componente esencial en el proceso de modelado. Las opciones de entrada requeridas para ello se han completado y se ha continuado trabajando en el entorno de simulación.

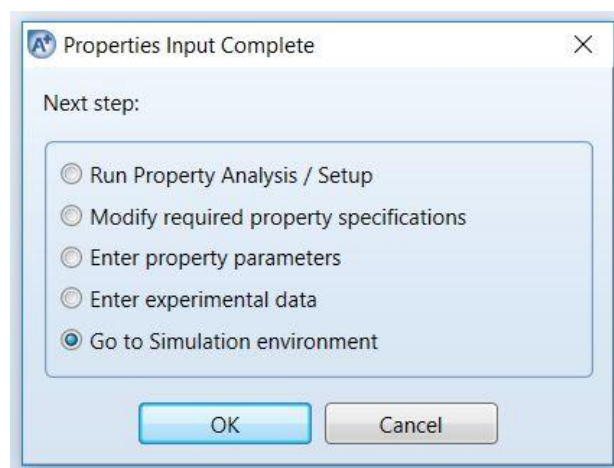


Figura 3.18. Continuación del modelo en el entorno de simulación. Fuente: Aspen Plus v8.6

### Corriente de alimentación: LODOS

El flujo de entrada al sistema LODOS está formado por el componente no convencional LODO. Su temperatura, presión, caudal y composición debe ser especificado en la hoja NC Solid.

Figure 3.19 shows the 'Specifications' tab for the 'LODOS (MATERIAL) - Input' stream. The 'NC Solid' option is selected. The 'State variables' section includes fields for Substream name (NC), Temperature (25 C), Pressure (1 atm), Total flow basis (Mass), and Total flow rate (1,44 gm/min). The 'Composition' section shows 'Mass-Frac' basis and a table with components LODO (Value: 1) and CENIZA (Value: 0), with a Total of 1.

Figura 3.19. Especificación de la corriente de alimentación LODOS.

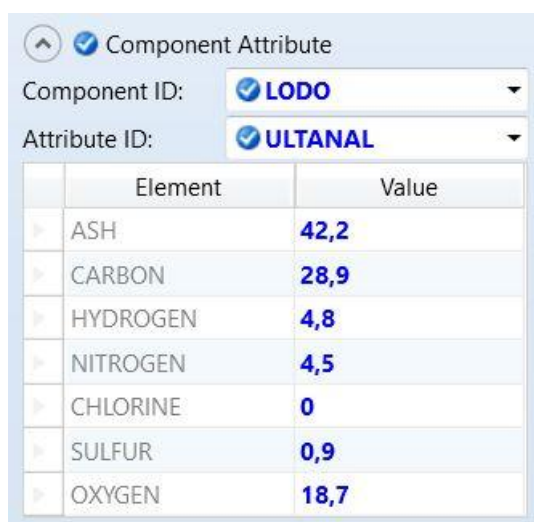
Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

A continuación se introducen los atributos de la composición del componente no convencional LODO, importando los resultados de las pruebas de caracterización físico-química realizadas en el laboratorio. Los valores de los análisis proximal, elemental y sulfanal están dados en porcentaje en peso en base seca, excepto para la humedad en el proximal. La materia volátil VM corresponde a la diferencia entre el porcentaje de materia orgánica y el del carbón fijo del análisis proximal del lodo.

Figure 3.20 shows the 'Component Attribute' tab for the 'LODO' component. The 'Attribute ID' is 'PROXANAL'. The table below lists the proximal analysis values:

Element	Value
MOISTURE	10
FC	10
VM	47,8
ASH	42,2

Figura 3.20. Análisis proximal del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



Component Attribute

Component ID: **LODO**

Attribute ID: **ULTANAL**

	Element	Value
▶	ASH	<b>42,2</b>
▶	CARBON	<b>28,9</b>
▶	HYDROGEN	<b>4,8</b>
▶	NITROGEN	<b>4,5</b>
▶	CHLORINE	<b>0</b>
▶	SULFUR	<b>0,9</b>
▶	OXYGEN	<b>18,7</b>

Figura 3.21. Análisis elemental del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

El análisis sulfanal no se ha llevado a cabo en los ensayos de laboratorio, por lo que sus valores se han obtenido de fuentes bibliográficas. Varios autores coinciden en que el azufre de origen pirítico supone un 45% del azufre total contenido en el lodo y otros tipos de biomasa. El azufre de origen orgánico representa otro 45% y, por tanto, el sulfato es un 10% del azufre total del lodo (Mora, 2012; Muazu et al., 2015).



Component Attribute

Component ID: **LODO**

Attribute ID: **SULFANAL**

	Element	Value
▶	PYRITIC	<b>0,405</b>
▶	SULFATE	<b>0,09</b>
▶	ORGANIC	<b>0,405</b>

Figura 3.22. Análisis sulfanal del lodo. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Los valores del análisis proximal (PROXANAL), elemental (ULTANAL) y sulfanal (SULFANAL) deben cumplir los siguientes requisitos para una correcta especificación de los componentes no convencionales:

- \*Los valores del SULFANAL deben sumar el valor del azufre en el ULTANAL.
- \*Los valores para la ceniza en el ULTANAL y en el PROXANAL deben coincidir.
- \*Los valores del ULTANAL deben sumar 100.
- \*Los valores de carbono fijo, materia volátil y ceniza tienen que sumar 100 en el PROXANAL.

#### Bloque reactor RYield: DESCOMP

Se introducen las condiciones de operación del reactor de rendimiento, el cual trabaja a presión atmosférica y a la temperatura de gasificación.



Operating conditions

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

Temperature: **800** **C**

Temperature change: **K**

Pressure: **1** **atm**

Duty: **cal/sec**

Vapor fraction:

Figura 3.23. Condiciones de operación del bloque DESCOMP. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Este reactor descompone la alimentación LODOS en compuestos convencionales, siguiendo una distribución de rendimientos. Esta distribución de rendimientos en DESCOMP viene dada por el análisis ULTANAL del lodo alimentado, convertido en base húmeda.

Yield specification

Yield options: **Component yields**

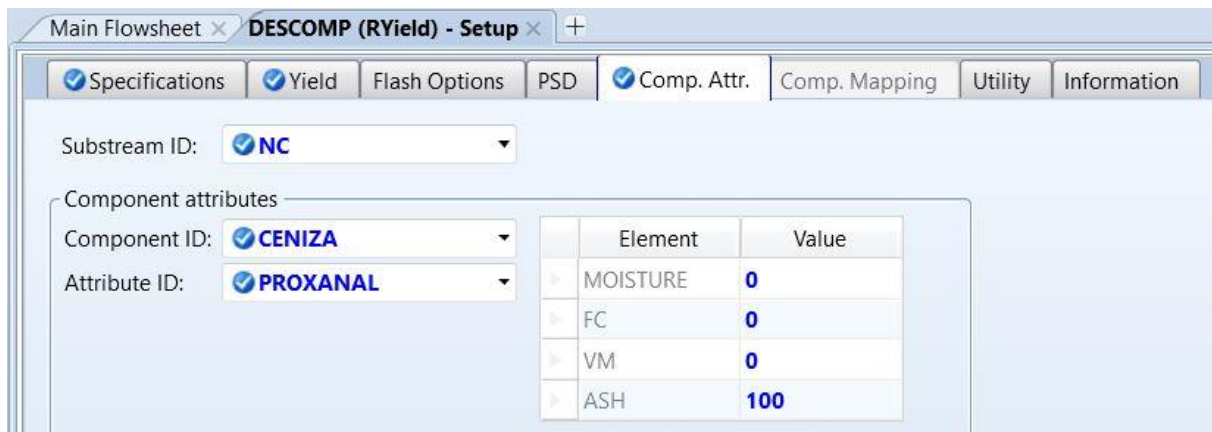
Component yields

Component	Basis	Basis Yield
H2O	Mass	0,1
CENIZA	Mass	0,3798
C (CISOLID)	Mass	0,2601
H2	Mass	0,0432
N2	Mass	0,0405
S	Mass	0,0081
O2	Mass	0,1683

Figura 3.24. Distribución de rendimientos en DESCOMP. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

También hay que definir los atributos de la composición del elemento no convencional CENIZA, importando sus análisis proximal, elemental y sulfanal.

### 3. METODOLOGÍA



Substream ID: **NC**

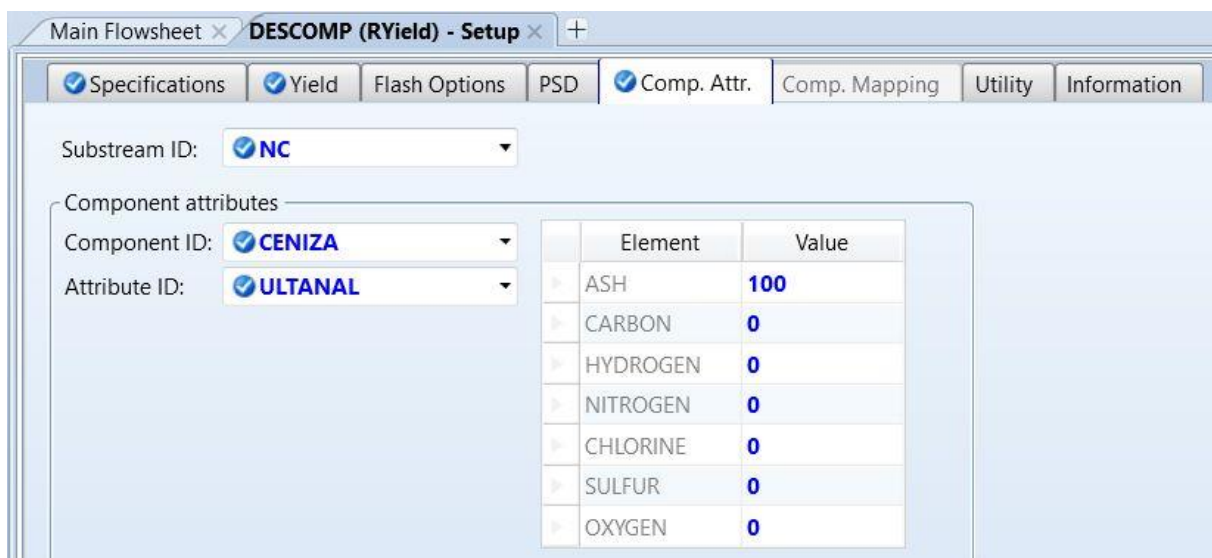
Component attributes

Component ID: **CENIZA**

Attribute ID: **PROXANAL**

Element	Value
MOISTURE	0
FC	0
VM	0
ASH	100

Figura 3.25. Análisis proximal de la ceniza. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



Substream ID: **NC**

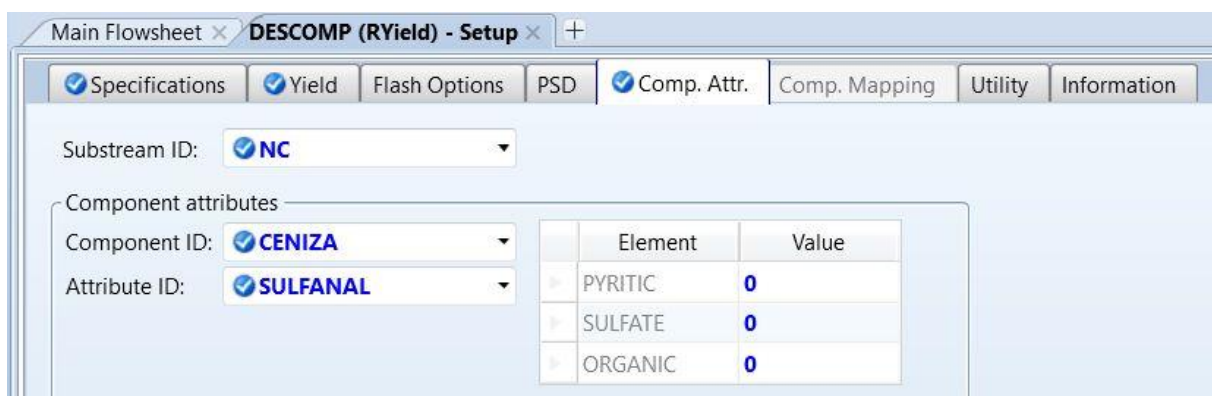
Component attributes

Component ID: **CENIZA**

Attribute ID: **ULTANAL**

Element	Value
ASH	100
CARBON	0
HYDROGEN	0
NITROGEN	0
CHLORINE	0
SULFUR	0
OXYGEN	0

Figura 3.26. Análisis elemental de la ceniza. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



Substream ID: **NC**

Component attributes

Component ID: **CENIZA**

Attribute ID: **SULFANAL**

Element	Value
PYRITIC	0
SULFATE	0
ORGANIC	0

Figura 3.27. Análisis sulfanal de la ceniza. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



Bloque separador Sep2: CSEP

En este módulo se define la fracción del carbono inicial del lodo que no reacciona (10% en masa) y que sale en la corriente CFIJO. Esta especificación hay que realizarla en todas las subcorrientes (MIXED, CISOLID, NC).

Component ID	1st Spec	2nd Spec
H2	Split fraction 0	Mole frac
O2	Split fraction 0	Mole frac
N2	Split fraction 0	Mole frac
H2O	Split fraction 0	Mole frac
CO	Split fraction 0	Mole frac
CO2	Split fraction 0	Mole frac
CH4	Split fraction 0	Mole frac
H2S	Split fraction 0	Mole frac
H3N	Split fraction 0	Mole frac
S	Split fraction 0	Mole frac
C	Split fraction 0,1	Mole frac

Figura 3.28. Fracción de carbono fijo en la subcorriente MIXED de CFIJO.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Component ID	1st Spec	2nd Spec
C	Split fraction 0,1	Mole frac

Figura 3.29. Fracción de carbono fijo en la subcorriente CISOLID de CFIJO.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Component ID	1st Spec	2nd Spec
LODO	Split fraction 0	Mass frac
CENIZA	Split fraction 0	Mass frac

Figura 3.30. Fracción de carbono fijo en la subcorriente NC de CFIJO.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Bloque reactor RStoic: RNOEQ

Este reactor trabaja a presión atmosférica y a la temperatura de gasificación. Estas condiciones deben ser introducidas por el usuario en el programa de simulación.

Figure 3.31 shows the configuration window for the RNOEQ (RStoic) reactor block. The 'Specifications' tab is selected. The 'Operating conditions' section includes the following settings:

Parameter	Value	Unit
Flash Type	Temperature	Pressure
Temperature	800	C
Pressure	1	atm
Duty		cal/sec
Vapor fraction		

Figura 3.31. Condiciones de operación del bloque RNOEQ. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

En el reactor estequiométrico RNOEQ todo el nitrógeno del lodo se transforma en amoníaco y todo el azufre en ácido sulfhídrico. Por tanto, se producen reacciones completas con una conversión total para el  $N_2$  y el S. En el simulador deben introducirse la estequiometría de estas dos reacciones y su grado de conversión.

Figure 3.32 shows the 'Edit Stoichiometry' window for Reaction No. 1. The reactants and products are defined as follows:

Reactants	Component	Coefficient
▶	N2	-0,5
▶	H2	-1,5

Products	Component	Coefficient
▶	H3N	1

Products generation settings:

- ☐ Molar extent: kmol/hr
- ☒ Fractional conversion: 1 of component N2

Figura 3.32. Reacción de conversión del nitrógeno en RNOEQ. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

**Edit Stoichiometry**

Reaction No.: 2

Reactants	
Component	Coefficient
H2	-1
S	-1

Products	
Component	Coefficient
H2S	1

Products generation

☐ Molar extent:  kmol/hr

☒ Fractional conversion: 1 of component S

OK Close

Figura 3.33. Reacción de conversión del azufre en RNOEQ. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Main Flowsheet x RNOEQ (RStoic) x +

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No.	Specification type	Stoichiometry
1	Frac. conversion	0,5 N2(MIXED) + 1,5 H2(MIXED) --> H3N(MIXED)
2	Frac. conversion	H2(MIXED) + S(MIXED) --> H2S(MIXED)

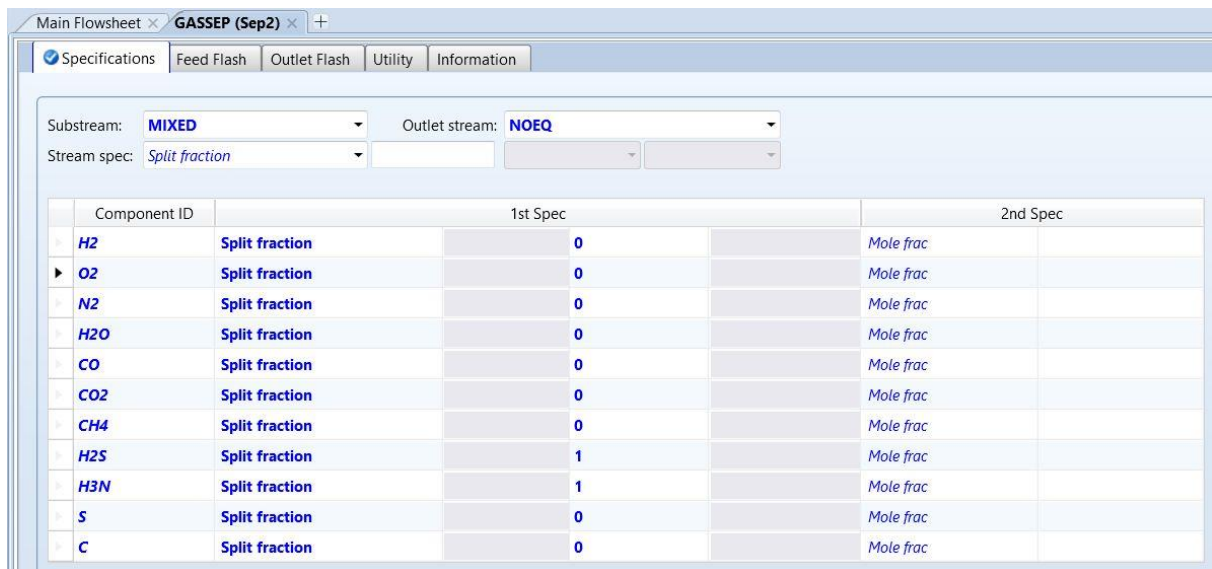
New... Edit Delete Copy Paste

Figura 3.34. Estequiometría de las reacciones en RNOEQ. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Bloque separador Sep2: GASSEP

En este módulo se ha indicado que todo el amoníaco y el ácido sulfhídrico se separan en la corriente NOEQ, especificando una fracción de separación igual a la unidad para cada uno de estos compuestos en la subcorriente MIXED.

### 3. METODOLOGÍA

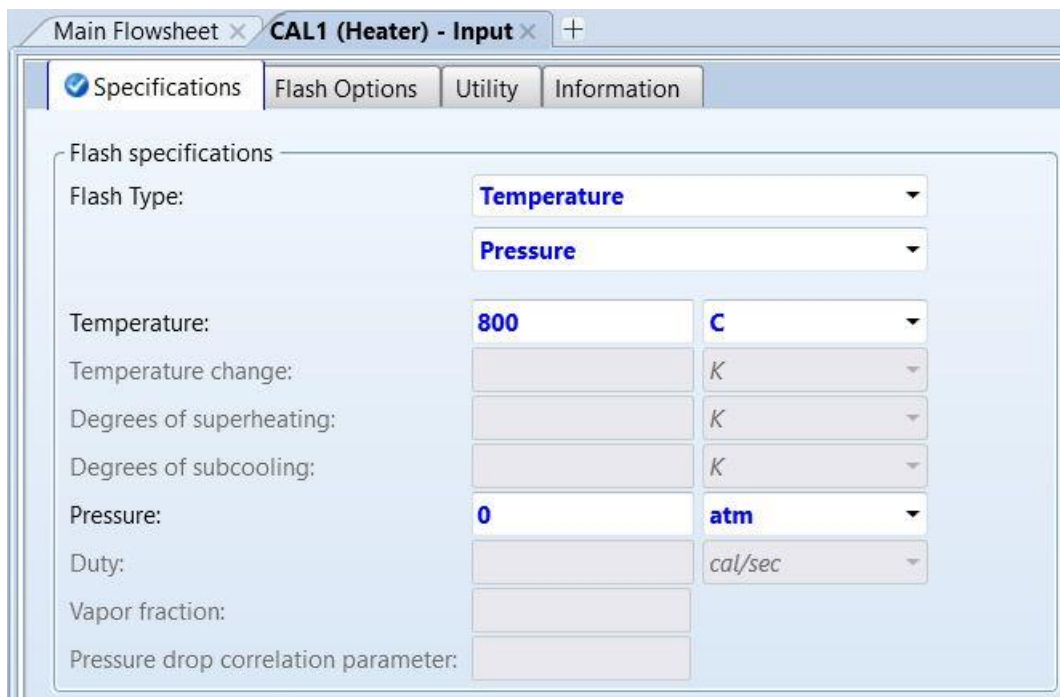


Component ID	1st Spec	2nd Spec
H2	Split fraction 0	Mole frac
O2	Split fraction 0	Mole frac
N2	Split fraction 0	Mole frac
H2O	Split fraction 0	Mole frac
CO	Split fraction 0	Mole frac
CO2	Split fraction 0	Mole frac
CH4	Split fraction 0	Mole frac
H2S	Split fraction 1	Mole frac
H3N	Split fraction 1	Mole frac
S	Split fraction 0	Mole frac
C	Split fraction 0	Mole frac

Figura 3.35. Fracciones de separación de  $\text{NH}_3$  y  $\text{H}_2\text{S}$  en la subcorriente MIXED de NOEQ.  
Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

#### Bloque calentador Heater: CAL1

Este módulo vuelve a calentar la corriente NOEQ hasta la temperatura especificada de gasificación. El valor nulo para el parámetro “Pressure” indica que no hay caída de presión dentro del cambiador.



Flash specifications

Flash Type: Temperature

Pressure: 0 atm

Temperature: 800 C

Temperature change: K

Degrees of superheating: K

Degrees of subcooling: K

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Figura 3.36. Condiciones de operación del bloque CAL1. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Corriente de entrada: AIRE

Las condiciones termodinámicas de presión y temperatura de la alimentación de aire precalentado se han fijado en la subcorriente MIXED. Además, se ha establecido su composición molar (formada por nitrógeno y oxígeno) y su caudal volumétrico total en las condiciones de operación descritas.

Figure 3.37 shows the Aspen Plus v8.6 interface for specifying the 'AIRE (MATERIAL)' stream. The 'Mixed' option is selected under 'Flash Type'. The 'State variables' section shows Temperature set to 450 C and Pressure set to 1 atm. The 'Total flow basis' is set to Volume and the 'Total flow rate' is 3,39 l/min. The 'Composition' section shows a 'Mole-Frac' table with H2, O2 (0,21), N2 (0,79), H2O, CO, CO2, CH4, H2S, H3N, S, and C. The total is 1.

Component	Value
H2	
O2	0,21
N2	0,79
H2O	
CO	
CO2	
CH4	
H2S	
H3N	
S	
C	
Total:	1

Figura 3.37. Especificación corriente de entrada de aire. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Bloque reactor RGibbs: GASIF1

En el reactor de equilibrio GASIF1 sólo es necesario especificar la presión de operación (atmosférica), pues su tasa de calor viene establecida por los flujos de energía QDESCOMP y QNOEQ que se introducen en el bloque.

Este gasificador calcula el equilibrio químico y las fases de equilibrio por minimización de la energía libre de Gibbs del sistema sin necesidad de especificar la estequiometría de las reacciones involucradas. Para ello, se ha seleccionado la opción “*Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium*”.

Calculation option:  
*Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium*

Operating conditions

Pressure: 1 atm

Temperature: K

Heat Duty: cal/sec

Phases

Maximum number of fluid phases: 1

Maximum number of solid solution phases: 0

☒ Include vapor phase

☐ Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream

Figura 3.38. Condiciones de operación del bloque GASIF1. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

En la hoja “*Products*” se han seleccionado de la lista de productos aquellos que pueden existir cuando se establezca el equilibrio en el gasificador. En este proceso, todos los componentes pueden aparecer en la corriente parcial MIXED, excepto el carbono que es un producto sólido. Por ello, se ha especificado que el carbono se encuentra en fase de sólido puro (“*Pure Solid*”) al alcanzarse el equilibrio y no forma soluciones sólidas.

RGibbs considers all components as products

☒ Identify possible products

☐ Define phases in which products appear

Hydrate-check: *Rigorous*

Products

Component	Valid phases
H2	Mixed
O2	Mixed
N2	Mixed
H2O	Mixed
CO	Mixed
CO2	Mixed
CH4	Mixed
C	PureSolid

Figura 3.39. Productos del proceso de gasificación en GASIF1. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



En las hipótesis del modelo se ha asumido que sólo se forma amoníaco a partir del nitrógeno contenido en el lodo. Por tanto, el  $N_2$  del aire no reacciona y se define como componente inerte.

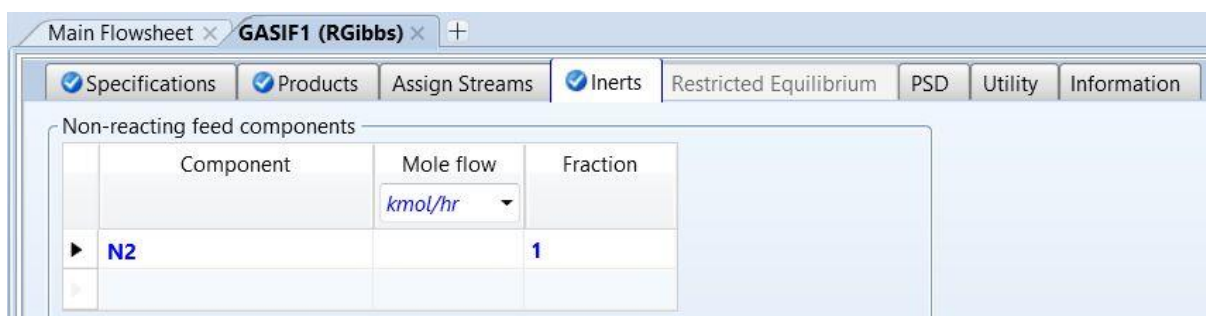


Figura 3.40. Nitrógeno inerte del aire en GASIF1. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Bloque separador Sep2: CENSEP

Este módulo elimina las cenizas de la etapa de gasificación. Por ello, se especifica una fracción igual a la unidad para el componente no convencional CENIZA en la subcorriente NC del flujo de salida CENIZAS del bloque separador.



Figura 3.41. Fracción de separación de la ceniza. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Bloque reactor RGibbs: GASIF2

En este reactor se han seleccionado las condiciones de operación, tanto la presión (atmosférica) como la temperatura de gasificación.

Se ha elegido la opción de cálculo que permite estimar un equilibrio químico restringido realizando una aproximación de temperatura en las reacciones que tienen lugar en el reactor (*“Restrict chemical equilibrium – specify temperature approach or reactions”*).

### 3. METODOLOGÍA

Calculation option:  
**Restrict chemical equilibrium - specify temperature approach or reactions**

Operating conditions

Pressure: 1 atm

Temperature: 800 C

Heat Duty: cal/sec

Phases

Maximum number of fluid phases: 1

Maximum number of solid solution phases: 0

☒ Include vapor phase

☐ Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream

Figura 3.42. Condiciones de operación de GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Se han identificado los posibles productos del proceso y se ha indicado que el carbono se encuentra en fase de sólido puro.

RGibbs considers all components as products

Identify possible products

Define phases in which products appear

Hydrate-check: Rigorous

Products

Component	Valid phases
H2	Mixed
O2	Mixed
N2	Mixed
H2O	Mixed
CO	Mixed
CO2	Mixed
CH4	Mixed
C	PureSolid

Figura 3.43. Productos del proceso de gasificación en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6



El nitrógeno del aire no reacciona durante la gasificación y se considera como componente inerte.

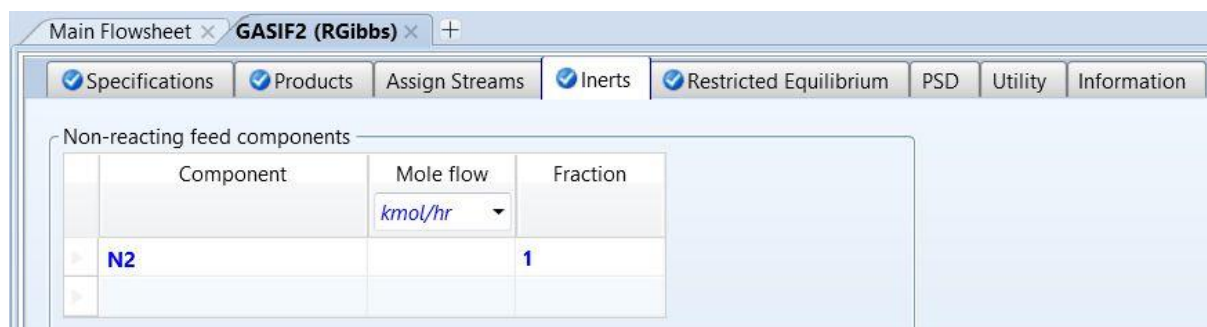


Figura 3.44. Nitrógeno inerte del aire en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

En la pestaña “*Restricted Equilibrium*” se define la estequiometría de cada una de las reacciones que tienen lugar en el proceso y se establece una aproximación de temperatura de gasificación para cada una de ellas.

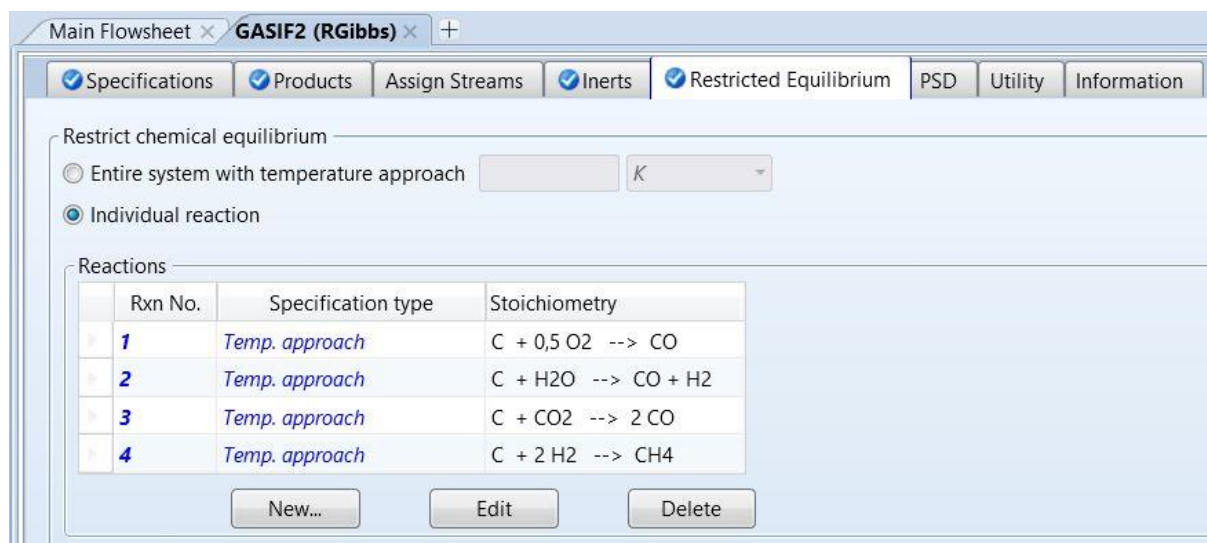


Figura 3.45. Reacciones químicas en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

**Edit Stoichiometry**

Reaction No.: **1**

**Reactants**

Component	Coefficient
<b>C</b>	<b>-1</b>
<b>O2</b>	<b>-0,5</b>

**Products**

Component	Coefficient
<b>CO</b>	<b>1</b>

**Products generation**

☐ Molar extent:  kmol/hr

☒ Temperature approach: **500** **DELTA-C**


 **Close**

Figura 3.46. Reacción de combustión incompleta en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

**Edit Stoichiometry**

Reaction No.: **2**

**Reactants**

Component	Coefficient
<b>C</b>	<b>-1</b>
<b>H2O</b>	<b>-1</b>

**Products**

Component	Coefficient
<b>CO</b>	<b>1</b>
<b>H2</b>	<b>1</b>

**Products generation**

☐ Molar extent:  kmol/hr

☒ Temperature approach: **-286,9** **DELTA-C**


 **Close**

Figura 3.47. Reacción *water-gas* en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

**Edit Stoichiometry**

Reaction No.: **3**

**Reactants**

	Component	Coefficient
▶	<b>C</b>	<b>-1</b>
▶	<b>CO2</b>	<b>-1</b>
▶		

**Products**

	Component	Coefficient
▶	<b>CO</b>	<b>2</b>
▶		

**Products generation**

☐ Molar extent:  kmol/hr

☒ Temperature approach: **-227,1** **DELTA-C**


 **Close**

Figura 3.48. Reacción de Boudouard en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

**Edit Stoichiometry**

Reaction No.: **4**

**Reactants**

	Component	Coefficient
▶	<b>C</b>	<b>-1</b>
▶	<b>H2</b>	<b>-2</b>
▶		

**Products**

	Component	Coefficient
▶	<b>CH4</b>	<b>1</b>
▶		

**Products generation**

☐ Molar extent:  kmol/hr

☒ Temperature approach: **-324** **DELTA-C**


 **Close**

Figura 3.49. Reacción de metanización en GASIF2. Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Bloque mezclador Mix: MIX1

Este módulo une la corriente gaseosa que sale del gasificador GASIF2 y el flujo CNOEQ que contiene amoníaco y ácido sulfhídrico. En este mezclador no es necesario realizar ninguna especificación de diseño, pues se ha supuesto que no hay caída de presión en este bloque.

The screenshot shows the 'MIX1 (Mixer)' block configuration in Aspen Plus v8.6. The 'Flash Options' tab is selected. The 'Mixer specifications' section includes a Pressure field set to 0 atm and a Valid phases dropdown set to Vapor-Liquid. The 'Temperature estimate' section has a unit dropdown set to K. The 'Convergence parameters' section shows Maximum iterations set to 30 and Error tolerance set to 0,0001.

Figura 3.50. Opciones del mezclador MIX1. Fuente: Aspen Plus v8.6

Bloque separador Sep2: GSEP

Este módulo elimina el carbono sólido (flujo OTROS) que queda en GASIF2 de la corriente gaseosa. La corriente resultante GASES es el gas producto del proceso de gasificación. En la subcorriente MIXED del flujo GASES se seleccionan sólo los componentes gaseosos.

The screenshot shows the 'GSEP (Sep2)' block configuration in Aspen Plus v8.6. The 'Specifications' tab is selected. The Substream is set to MIXED and the Outlet stream is set to GASES. The Stream spec is set to Split fraction. Below this, a table lists components and their separation specifications.

Component ID	1st Spec	2nd Spec
H2	Split fraction	Mole frac
O2	Split fraction	Mole frac
N2	Split fraction	Mole frac
H2O	Split fraction	Mole frac
CO	Split fraction	Mole frac
CO2	Split fraction	Mole frac
CH4	Split fraction	Mole frac
H2S	Split fraction	Mole frac
H3N	Split fraction	Mole frac
S	Split fraction	Mole frac
C	Split fraction	Mole frac

Figura 3.51. Fracciones de separación de los componentes gaseosos en la subcorriente MIXED de GASES.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Bloque mezclador Mix: MIX2

Las corrientes CENIZAS, CFIJO y OTROS se mezclan en este bloque MIX2, dando lugar al residuo sólido del proceso. En este mezclador no es necesario realizar ninguna especificación de diseño, pues se ha supuesto que no hay caída de presión en este módulo.

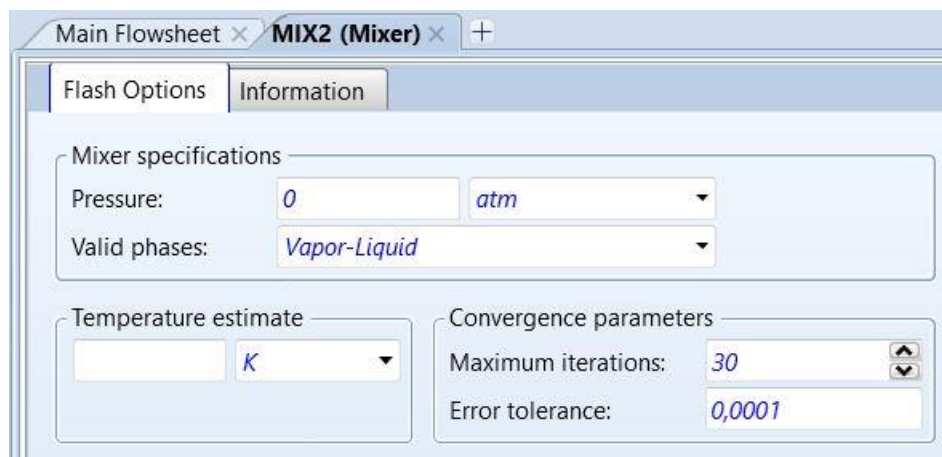


Figura 3.52. Opciones del mezclador MIX2. Fuente: Aspen Plus v8.6

Con esto, ha finalizado la construcción del modelo de gasificación de lodos con Aspen Plus. Para terminar, se ha corrido la simulación con éxito y se han obtenido resultados válidos, como se observa en la Figura 3.53.



### 3.2.6. Determinación de las aproximaciones de temperatura

Como se ha mencionado anteriormente, para establecer el equilibrio restringido en el bloque GASIF2 del modelo, es necesario determinar una diferencia de temperatura con respecto a la de gasificación para cada reacción especificada. Este método permite ajustar los resultados del modelo de simulación con los obtenidos en los ensayos de laboratorio.

Este ajuste se realiza en Aspen Plus mediante la opción “*Data Fit*” en la carpeta “*Model Analysis Tools*”. “*Data Fit*” es capaz de estimar los parámetros de entrada (en este caso las aproximaciones de temperatura) que proporcionan la mejor concordancia entre los resultados del modelo y los experimentales (composición de los gases de salida), por minimización de la suma ponderada de cuadrados de la diferencia entre ambos valores.

#### Data Set

El primer paso es introducir en el *software* el conjunto de datos experimentales a los que se desean ajustar los resultados del modelo. Estos datos son las concentraciones de los gases de salida del proceso.

Se crea un conjunto de variables DS-1 de tipo *Point-Data*, ya que se quieren establecer los valores de composición en un determinado punto de operación en estado estacionario, es decir, no se desea conocer la evolución de dichas variables en el tiempo.

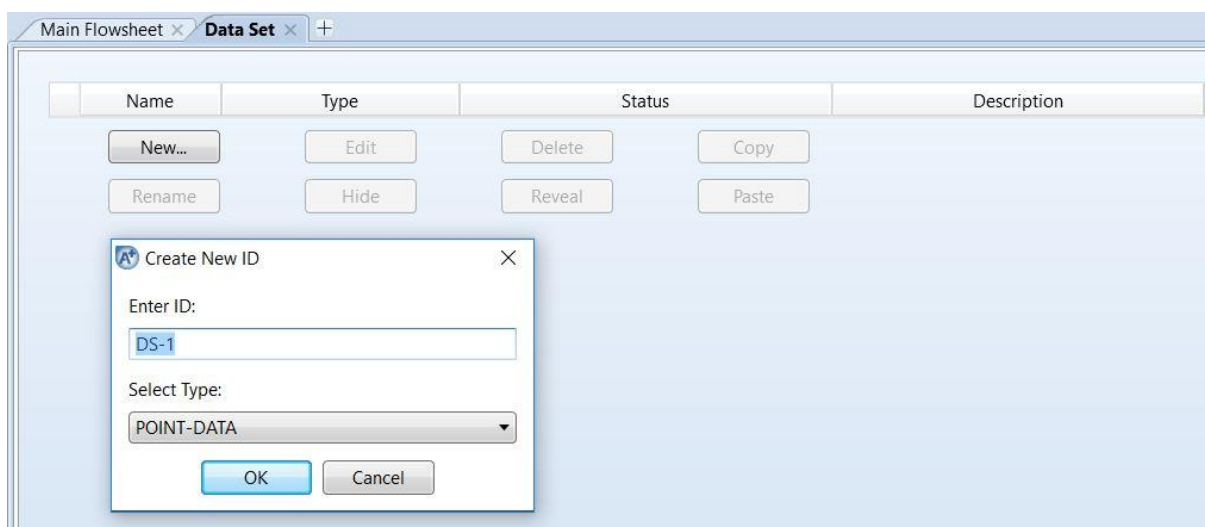


Figura 3.54. Conjunto de valores DS-1 de tipo Point-Data. Fuente: Aspen Plus v8.6

Se define en el programa el tipo de variable de los datos experimentales. Los datos de composición de los gases de salida se especifican como flujos másicos de los componentes, lo que evita problemas de cálculo en el *software* cuando se utilizan fracciones.



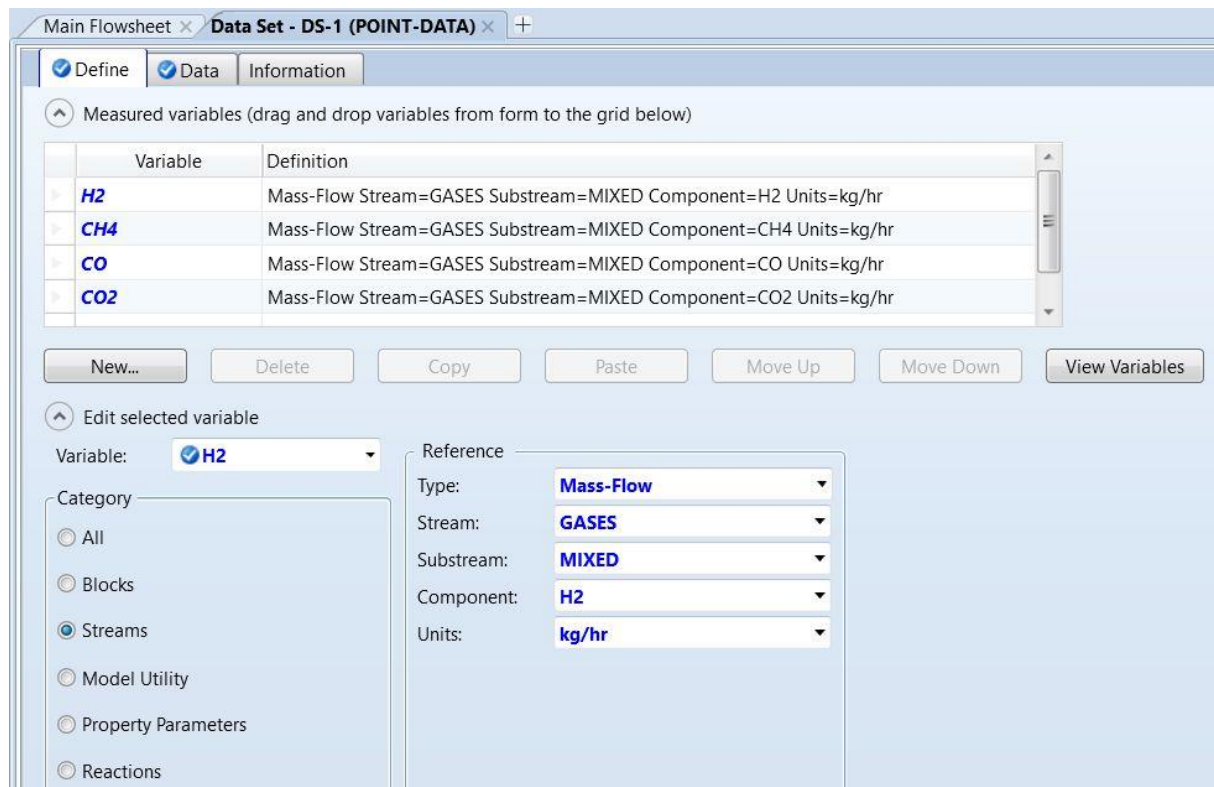


Figura 3.55. Especificación del tipo de variable de los datos experimentales.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Se introducen los valores de los datos experimentales de composición de los gases, indicando que la variable es un resultado del proceso de gasificación (“*Result*”). Se establece una desviación estándar para cada uno, la cual mide el grado de incertidumbre de los resultados obtenidos por el modelo.

	H2	CH4	CO	CO2
Use	Result	Result	Result	Result
Std-Dev	1%	1%	1%	1%
Data	0,000986	0,002276	0,01062	0,029414

Figura 3.56. Valores y desviación estándar de los datos de composición de los gases.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

### Regression

A continuación se establece una regresión DR-1 sobre el conjunto de datos DS-1.



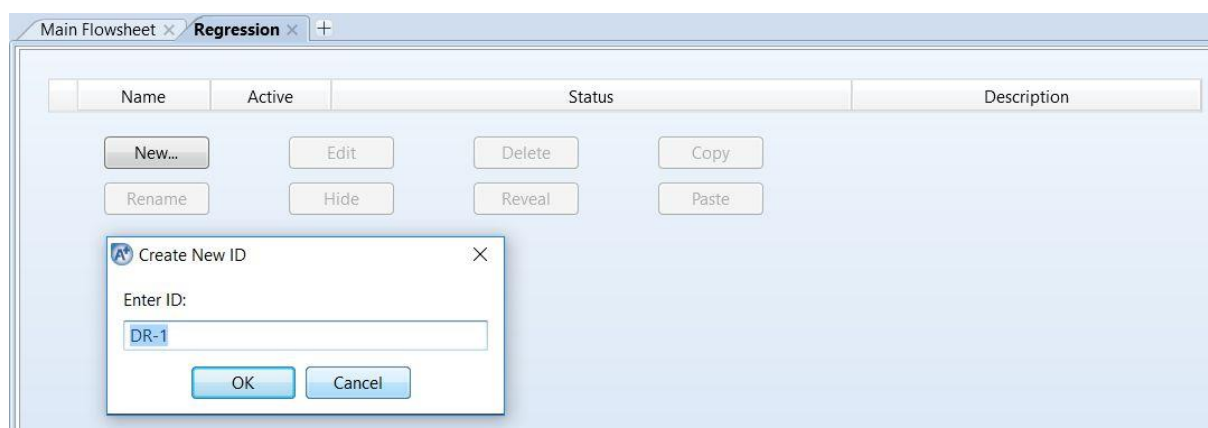


Figura 3.57. Regresión DR-1. Fuente: Aspen Plus v8.6

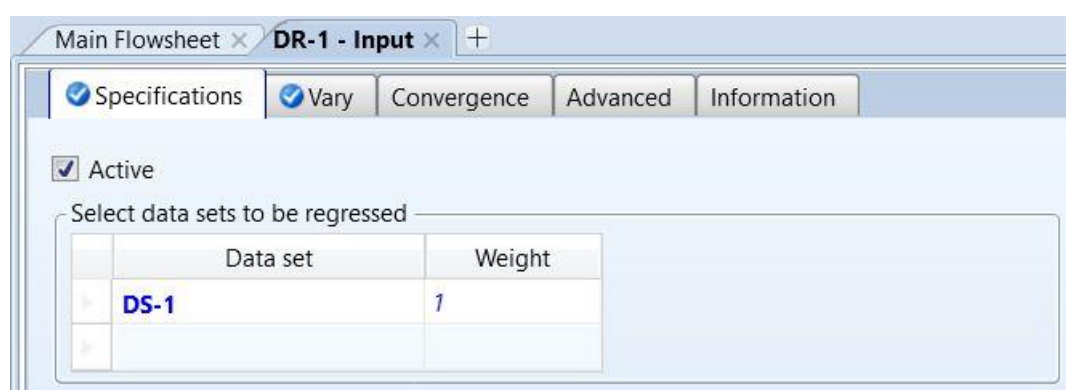
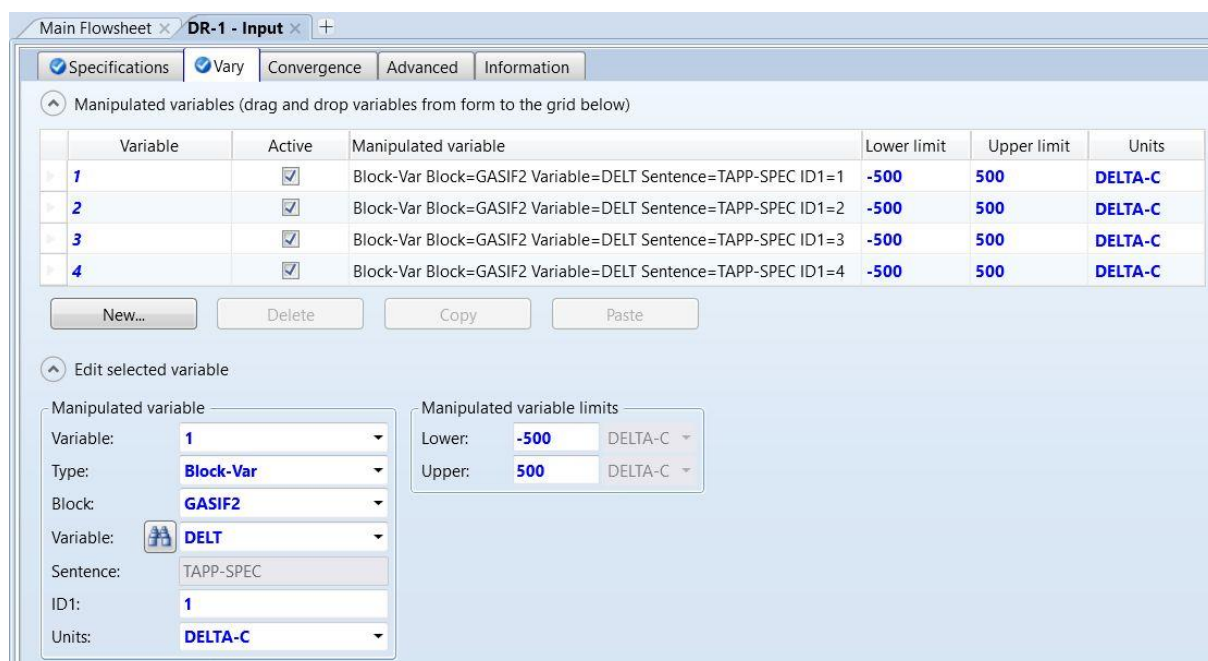


Figura 3.58. Conjunto de datos seleccionados DS-1 para la regresión DR-1. Fuente: Aspen Plus v8.6

La variable manipulada que se desea calcular para lograr el ajuste por regresión es la aproximación de la temperatura  $\Delta T$  para cada reacción.

Figura 3.59. Tipo de variable manipulada y rango de  $\Delta T$ . Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Una vez definido el tipo de variable manipulada y su rango de valores, se corre la simulación del caso base ( $T = 800^{\circ}\text{C}$ ;  $ER = 0,3$ ;  $S/B = 0$ ) con  $\Delta T = 0$  como valor inicial de la regresión en todas las reacciones especificadas en GASIF2.

La regresión establece los valores de la aproximación de temperatura  $\Delta T$  en cada reacción que logran el mejor ajuste entre los datos de composición experimentales y los resultados del modelo de simulación. Los valores de  $\Delta T$  obtenidos se muestran en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7. Aproximaciones de temperatura de las reacciones en GASIF2. Fuente: Aspen Plus v8.6

Reacción	Aproximación de temperatura $\Delta T$ ( $^{\circ}\text{C}$ )
1- Combustión incompleta	500
2- Reacción <i>water-gas</i>	-286,9
3- Reacción de Boudouard	-227,1
4- Reacción de metanización	-324

### 3.2.7. Modelo con inyección de vapor

La inyección de vapor es un parámetro de funcionamiento difícil de modelar. Por esta razón, para las simulaciones de los ensayos que emplean una mezcla de aire/vapor de agua como agente gasificante, se han desarrollado modificaciones en el modelo.

El diagrama de flujo del modelo de simulación con inyección de vapor se presenta en la Figura 3.60.

Los datos de partida del modelo con inyección de vapor son los correspondientes al ensayo número 6 (Tabla 3.5). Por tanto, las condiciones de operación son:  $T = 800^{\circ}\text{C}$ ;  $ER = 0,3$ ;  $S/B = 0,5$ ;  $Q_{\text{lodo}} = 1,44 \text{ g/min}$ ;  $Q_{\text{aire}} = 1,28 \text{ NL/min}$ ;  $Q_{\text{agua}} = 0,375 \text{ g/min}$ .

El vapor de agua generado en un precalentador a  $500^{\circ}\text{C}$  se introduce en el módulo GASIF1 junto con el aire. En la Figura 3.61 se expone la especificación de esta corriente de vapor en el programa de simulación.

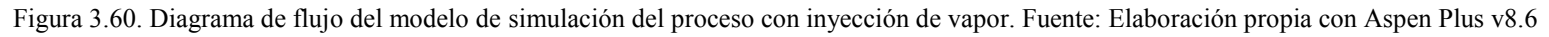


Figure 3.61 shows the Aspen Plus v8.6 interface for specifying a water vapor stream. The 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. The 'State variables' section includes Temperature (500 C), Pressure (1 atm), Vapor fraction (empty), Total flow basis (Mass), Total flow rate (0,375 gm/min), and Solvent (empty). The 'Composition' section shows 'Mass-Frac' with a table listing components H2, O2, N2, H2O (value 1), CO, CO2, CH4, H2S, H3N, S, and C. The total is 1.

Figura 3.61. Especificación de la corriente de vapor de agua.

Fuente: Elaboración propia con Aspen Plus v8.6

Cuando se gasifica con mezclas de aire/vapor de agua, la reacción de reformado con vapor y la de *water-gas shift* adquieren mayor relevancia. Con el fin de mantener el sistema de reacciones linealmente independiente, se han incluido las anteriores y se han eliminado la reacción de Boudouard y la de metanización en el bloque GASIF2.

- |                                      |                                      |
|--------------------------------------|--------------------------------------|
| 1- Combustión incompleta:            | $C + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$ |
| 2- Reacción <i>water-gas</i> :       | $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$      |
| 3- Reacción <i>water-gas shift</i> : | $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$   |
| 4- Reacción de reformado con vapor:  | $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$  |

Con estas reacciones, se ha establecido una nueva aproximación de la temperatura de gasificación para cada una de ellas. Los valores de  $\Delta T$  obtenidos en la regresión se muestran en la Tabla 3.8.

Tabla 3.8. Aproximaciones de temperatura de las reacciones en GASIF2 en el modelo con inyección de vapor.

Fuente: Aspen Plus v8.6

Reacción	Aproximación de temperatura $\Delta T$ ( $^{\circ}C$ )
1- Combustión incompleta	264,7
2- Reacción <i>water-gas</i>	-316,6
3- Reacción <i>water-gas shift</i>	445,1
4- Reacción de reformado con vapor	-321,9

## 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se muestran y evalúan los resultados obtenidos con el modelo de simulación de gasificación de lodos.

### 4.1. VALIDACIÓN DEL MODELO

El modelo con Aspen Plus fue validado frente a los resultados del ensayo número 1 (Tabla 3.5) de gasificación de lodos en la planta de laboratorio, siendo las condiciones de operación, en ambos casos:  $T = 800^{\circ}\text{C}$ ;  $ER = 0,3$ ;  $S/B = 0$ ;  $Q_{\text{lodos}} = 1,44 \text{ g/min}$ ;  $Q_{\text{aire}} = 1,28 \text{ NL/min}$ .

Para comparar los resultados de la simulación con los obtenidos durante las pruebas experimentales se ha calculado el error relativo (con signo positivo o negativo para determinar si las estimaciones se han realizado por exceso o por defecto, respectivamente).

El error relativo es el cociente entre el error absoluto (diferencia entre el valor obtenido en el modelo y el valor real) y el valor real del ensayo.

$$\varepsilon_r = \frac{X_i - \bar{X}}{\bar{X}} \cdot 100$$

En la Tabla 4.1 se presentan los resultados de composición, poder calorífico inferior y producción de los gases, conversión de carbono y eficiencia de la gasificación del caso base de los ensayos de laboratorio y del modelo, así como el error relativo de cada parámetro.

Tabla 4.1. Error relativo del modelo de Aspen Plus. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	ENSAYO 1	MODELO ASPEN PLUS	ERROR RELATIVO (%)
Composición gases (%v/v, base seca)			
H <sub>2</sub>	10,4	10,7	2,47
N <sub>2</sub>	60,8	58,3	-4,05
CH <sub>4</sub>	3,0	3,1	2,18
CO	8,0	8,1	1,29
CO <sub>2</sub>	14,1	14,0	-0,89
Y <sub>gas</sub> (Nm <sup>3</sup> /kg lodo, <i>daf</i> )	2,37	2,31	-2,33
X <sub>c</sub> (%)	65,28	62,38	-4,44
PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	3,30	3,27	-0,79
EG (%)	37,20	34,77	-6,54

Valores calculados en base seca

Y<sub>gas</sub>: producción de gases (Nm<sup>3</sup>/kg lodo, *daf*)

X<sub>c</sub>: conversión de carbono (%)

PCI: poder calorífico inferior del gas (MJ/Nm<sup>3</sup>)

EG: eficiencia de la gasificación (%)

#### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Según la Tabla 4.1, las predicciones del modelo son muy satisfactorias. Así, las composiciones de  $H_2$ ,  $CO$  y  $CO_2$  se han estimado con un error relativo inferior al 3%. La mayor diferencia entre los parámetros del modelo y de los ensayos no supera el 7% y se da en el cálculo de la eficiencia de gasificación (EG). Esto puede ser debido a las simplificaciones realizadas en el modelo, donde no se considera la formación de otros hidrocarburos distintos del metano (Doherty et al., 2008).

El modelo también fue validado para el caso base con inyección de vapor correspondiente al ensayo número 6 (Tabla 3.5), cuyas condiciones de operación son:  $T = 800^\circ C$ ;  $ER = 0,3$ ;  $S/B = 0,5$ ;  $Q_{lodos} = 1,44$  g/min;  $Q_{aire} = 1,28$  NL/min;  $Q_{agua} = 0,375$  g/min. La Tabla 4.2 compara los resultados de la simulación con los obtenidos experimentalmente.

Tabla 4.2. Error relativo del modelo de Aspen Plus con inyección de vapor. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	ENSAYO 6	MODELO ASPEN PLUS	ERROR RELATIVO (%)
Composición gases (%v/v, base seca)			
$H_2$	11,0	11,2	2,12
$N_2$	59,2	57,4	-2,98
$CH_4$	3,1	3,2	1,80
$CO$	8,4	8,3	-0,84
$CO_2$	14,8	14,1	-4,85
$Y_{gas}$ ( $Nm^3/kg$ lodo, <i>daf</i> )	2,60	2,35	-9,58
$X_c$ (%)	74,01	64,40	-12,98
PCI ( $MJ/Nm^3$ )	3,50	3,39	-3,04
EG (%)	41,00	36,60	-10,73

Valores calculados en base seca

$Y_{gas}$ : producción de gases ( $Nm^3/kg$  lodo, *daf*)

$X_c$ : conversión de carbono (%)

PCI: poder calorífico inferior del gas ( $MJ/Nm^3$ )

EG: eficiencia de la gasificación (%)

En la Tabla 4.2 se comprueba nuevamente que los resultados del modelo concuerdan bien con los obtenidos en las pruebas de laboratorio. El error en la estimación de la composición de  $H_2$ ,  $CO$  y  $CO_2$  no supera el 5%. La máxima diferencia entre los parámetros evaluados es algo mayor que en el caso de utilizar exclusivamente aire como agente gasificante. Este error (13% aproximadamente) se da en la conversión de carbono ( $X_c$ ) y, como se ha comentado anteriormente, puede deberse a la simplificación del modelo de considerar el metano como el único hidrocarburo formado durante el proceso de gasificación (Doherty et al., 2008). Además, conviene tener en cuenta que a la hora de comparar el valor simulado y valor experimental de  $X_c$  existe error tanto en la composición como en la producción de los gases de gasificación.

Por todo ello, se puede concluir que el modelo de simulación fue validado con éxito y que reproduce con precisión los resultados de los ensayos de gasificación de lodos de la planta a escala de laboratorio.

### 4.2. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

El análisis de sensibilidad permite estudiar la influencia de distintas variables de funcionamiento sobre los resultados del modelo. En este trabajo se evalúa el efecto que produce la temperatura, el *ratio* equivalente y el *ratio* vapor/biomasa en la eficiencia del proceso de gasificación (EG), en la conversión de carbono ( $X_c$ ) y en la composición en volumen, el poder calorífico inferior (PCI) y la producción de los gases ( $Y_{gas}$ ).

En la Tabla 4.3 se presentan los resultados de las simulaciones bajo distintas condiciones de operación. La temperatura se ha variado en un rango de  $T = 750 - 850$  °C, el *ratio* equivalente entre  $ER = 0,2 - 0,4$  y el intervalo del *ratio* vapor/biomasa es  $S/B = 0 - 1$ . Estos rangos de valores son los mismos que se han empleado en los ensayos de laboratorio.

Las estimaciones del modelo para la composición en volumen y la producción de gases se han calculado en base seca, ya que el agua será eliminada por condensación en los equipos de limpieza del gas de síntesis aguas abajo. Los valores de los volúmenes están dados en condiciones normales, lo que permite comparar los resultados del modelo con los obtenidos experimentalmente.

#### 4.2.1. Influencia de la temperatura

La temperatura es uno de los parámetros más influyentes en el proceso de gasificación con aire (Doherty et al., 2009). Para evaluar su efecto, se han realizado una serie de simulaciones a distintas temperaturas de gasificación (750°C, 800°C y 850°C) manteniendo un *ratio* equivalente constante ( $ER = 0,3$ ) y utilizando aire como agente gasificante ( $S/B = 0$ ).

##### - Composición del gas

En la Tabla 4.4 se presentan los valores de concentración del gas obtenidos en las simulaciones. La Figura 4.1 muestra la variación de la composición de  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO$  y  $CO_2$  con la temperatura.

En los resultados expuestos, se observa que al incrementar la temperatura se produce un aumento en las concentraciones de  $H_2$  y  $CO$ , mientras que las de  $CO_2$  y  $CH_4$  disminuyen.

Esta evolución de los componentes del gas se explica por el efecto de la temperatura en todas las reacciones químicas implicadas en el proceso de gasificación. Según el principio de Le Châtelier, un incremento de la temperatura favorece a los reactivos en las reacciones exotérmicas y a los productos en las endotérmicas (De Andrés, 2010).

#### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tabla 4.3. Resultados del modelo de Aspen Plus. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Nº simulación del ensayo								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
T (°C)	800	750	850	800	800	800	800	750	850
ER	0,3	0,3	0,3	0,2	0,4	0,3	0,3	0,3	0,3
S/B	0	0	0	0	0	0,5	1	0,5	0,5
Q <sub>lodos</sub> (g/min)	1,44	1,44	1,44	2,16	1,08	1,44	1,44	1,44	1,44
Composición gas (% v/v, base seca)									
H <sub>2</sub>	10,66	7,03	14,47	13,84	8,64	11,23	13,91	6,93	16,04
N <sub>2</sub>	58,34	63,72	52,39	51,52	62,32	57,44	51,91	64,46	49,63
CH <sub>4</sub>	3,08	3,41	2,50	4,99	2,08	3,16	4,45	3,02	2,90
CO	8,10	4,06	14,00	8,18	8,06	8,33	9,09	4,04	14,67
CO <sub>2</sub>	13,98	15,40	11,38	13,72	14,21	14,08	15,42	15,09	11,77
Y <sub>gas</sub> (Nm <sup>3</sup> /kg lodo, <i>daf</i> )	2,31	2,02	2,70	1,75	2,89	2,35	2,60	2,00	2,85
X <sub>c</sub> (%)	62,38	51,92	76,98	50,35	75,39	64,40	80,72	49,72	85,56
PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	3,27	2,49	4,22	4,31	2,69	3,39	4,24	2,34	4,62
EG (%)	34,77	23,08	52,26	34,58	35,70	36,60	50,62	21,42	60,38

Valores calculados en base seca

Y<sub>gas</sub>: producción de gases (Nm<sup>3</sup>/kg lodo, *daf*)

X<sub>c</sub>: conversión de carbono (%)

PCI: poder calorífico inferior del gas (MJ/Nm<sup>3</sup>)

EG: eficiencia de la gasificación (%)



#### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tabla 4.4. Composición del gas para distintas temperaturas en el modelo de simulación (ER = 0,3 y S/B = 0).

Fuente: Elaboración propia

Composición gas (% v/v, base seca)				
Temperatura (°C)	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>
750	7,03	3,41	4,06	15,40
800	10,66	3,08	8,10	13,98
850	14,47	2,50	14,00	11,38

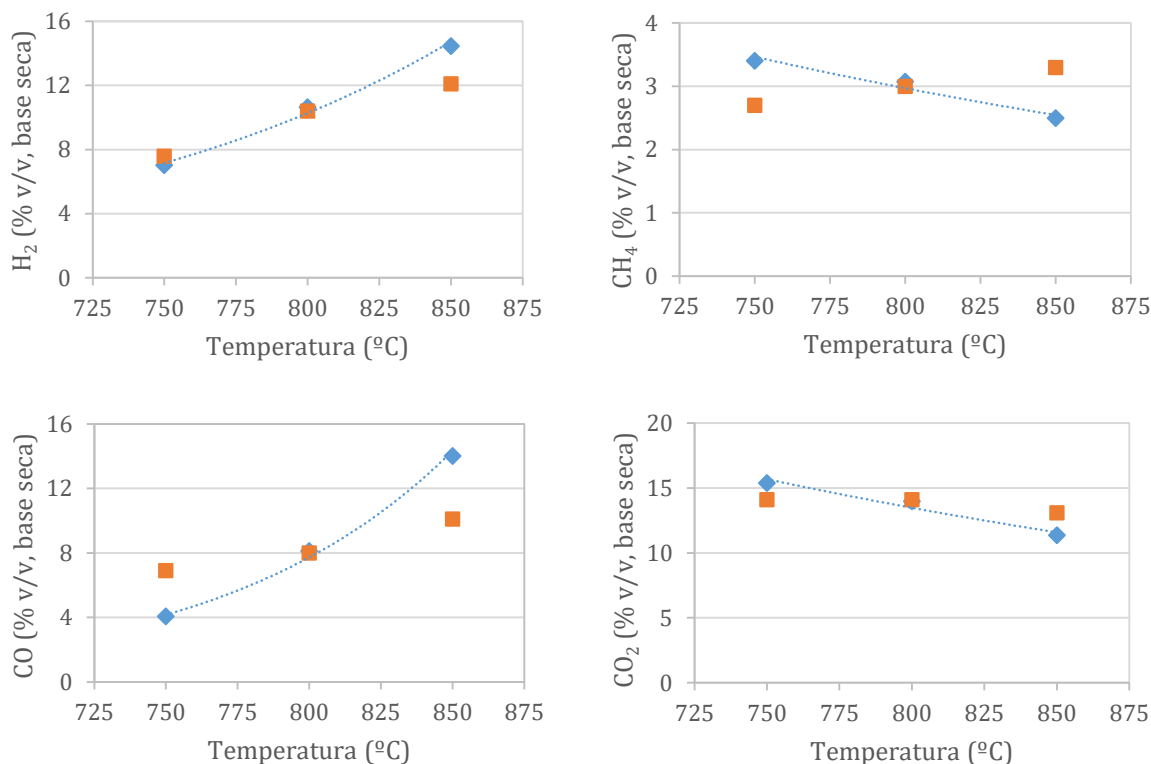


Figura 4.1. Evolución de la composición de los gases con la temperatura. Fuente: Elaboración propia.

(♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

El aumento en la producción de H<sub>2</sub> con la temperatura se justifica porque la reacción de metanización ( $C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$ ) es exotérmica y a altas temperaturas se favorece la reacción inversa (Doherty et al., 2008). Aunque la presencia de agua prácticamente se reduce a la humedad del lodo cuando se gasifica con aire (De Andrés, 2010), la formación de hidrógeno también se ve favorecida al incrementarse la temperatura en las reacciones endotérmicas *water-gas* ( $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ ) y de reformado con vapor ( $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$ ) y en seco ( $CH_4 + CO_2 \rightarrow 2CO + H_2$ ).

En general, el contenido en CH<sub>4</sub> de los gases de salida es bajo con respecto al resto de componentes, por lo que su variación no tendrá una influencia muy marcada en los parámetros de estudio (Pliego-Bravo et al., 2014). En la Figura 4.1 se muestra que un aumento de la temperatura reduce el contenido de CH<sub>4</sub> en las simulaciones. Esto se debe a que el metano es producto en la reacción de metanización (exotérmica) y reactivo en las de reformado (endotérmicas).

La reacción de Boudouard ( $C + CO_2 \rightarrow 2 CO$ ) tiene gran importancia a elevadas temperaturas cuando se utiliza aire como agente gasificante. Esta reacción es endotérmica y, al aumentar la temperatura, se favorece la formación de CO, al igual que ocurre en las reacciones de reformado y *water-gas*. El déficit de oxígeno durante el proceso de gasificación fomenta la combustión incompleta ( $C + 0,5 O_2 \rightarrow CO$ ) frente a la completa ( $C + O_2 \rightarrow CO_2$ ). Aunque la presencia de agua es limitada cuando se gasifica con aire, un incremento en la temperatura desplaza hacia la izquierda la reacción exotérmica de *water-gas shift* ( $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$ ), aumentando la producción de CO (Mitta et al., 2006).

El  $CO_2$  se comporta de forma contraria al  $H_2$  y al CO, es decir, a mayor temperatura disminuye su formación. Esto se debe principalmente a que las reacciones endotérmicas de Boudouard y de reformado en seco consumen  $CO_2$  al elevarse la temperatura (De Andrés et al., 2011; Nikoo y Mahinpey, 2008).

La Figura 4.1 también muestra la comparación entre la composición del gas obtenida en las simulaciones y en los resultados experimentales. Se observa que el modelo reproduce la misma tendencia que los ensayos de laboratorio al variar la temperatura para la composición de  $H_2$ , CO y  $CO_2$ . Los resultados de las pruebas están en buen acuerdo con los de las simulaciones, siendo las estimaciones de CO las menos acertadas.

Sin embargo, la tendencia del modelo con respecto a los ensayos se invierte para la concentración de  $CH_4$ . En las simulaciones, un aumento de la temperatura provoca un descenso de la formación de metano, mientras que en las pruebas experimentales su producción se incrementa ligeramente. La estimación de la concentración de  $CH_4$  es un problema común para los modelistas (Doherty et al., 2008). Esto puede ser debido a que el gas producto de la gasificación contiene además otros hidrocarburos (como el etano y el etileno) que no se han tenido en cuenta en el modelo. Además, los modelos de equilibrio no consideran tampoco la formación de alquitranes, que se favorece a temperaturas más bajas. Existen numerosos autores que muestran en los modelos de simulación del proceso de gasificación este decrecimiento de la concentración de  $CH_4$  al aumentar la temperatura (Nikoo y Mahinpey, 2008; Doherty et al., 2009; Ramzan et al., 2011). Además, otros investigadores (Gil-Lalaguna, 2015) han obtenido resultados experimentales en esa misma línea.

#### - Producción de gases ( $Y_{gas}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

En la Tabla 4.5 se presentan los valores de producción de gases y de conversión de carbono obtenidos en las simulaciones realizadas con aire y  $ER = 0,3$ . La Figura 4.2 muestra la variación de dichos parámetros con la temperatura y los compara con los experimentales.

Tabla 4.5. Producción de gases y conversión de carbono para distintas temperaturas en el modelo de simulación ( $ER = 0,3$  y  $S/B = 0$ ). Fuente: Elaboración propia

Temperatura (°C)	$Y_{gas}$ (Nm <sup>3</sup> /kg lodo, <i>daf</i> )	$X_c$ (%)
750	2,02	51,92
800	2,31	62,38
850	2,70	76,98

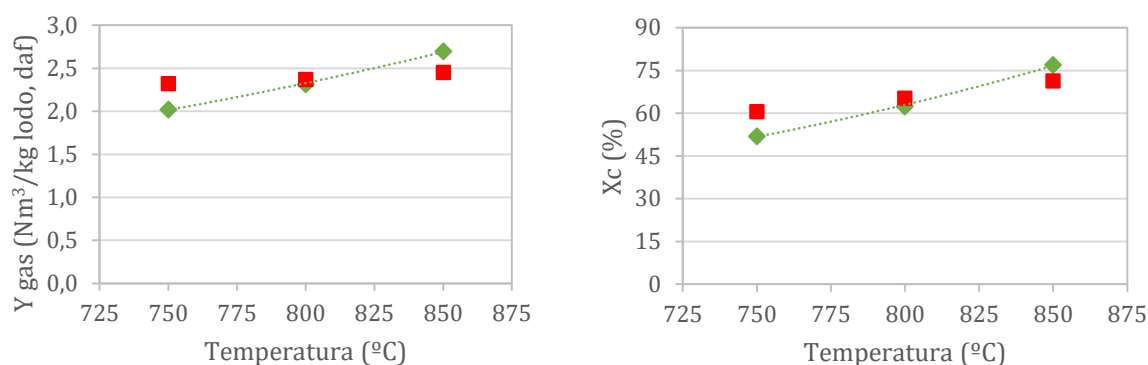


Figura 4.2. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

La producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) es una medida del rendimiento del proceso de gasificación, pues representa el volumen de gases producidos frente a la cantidad de lodo (libre de humedad y cenizas) introducido en el reactor. En la Figura 4.2 se observa que en las simulaciones la producción de gases aumenta con la temperatura.

La conversión de carbono ( $X_c$ ) es el cociente entre la cantidad de carbono presente en los gases producidos y el contenido en los lodos introducidos en el gasificador. En la Figura 4.2 se muestra que al elevarse la temperatura también se incrementa la conversión de carbono.

El modelo y los ensayos proporcionan resultados similares en cuanto a la producción de gases y conversión de carbono, siguiendo ambos parámetros la misma tendencia creciente con la temperatura de gasificación.

#### - Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

La Tabla 4.6 y la Figura 4.3 exponen los valores obtenidos en las simulaciones del poder calorífico inferior (PCI) de los gases y de la eficiencia de la gasificación (EG) a distintas temperaturas.

Tabla 4.6. Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintas temperaturas en el modelo de simulación (ER = 0,3 y S/B = 0). Fuente: Elaboración propia

Temperatura (°C)	PCI (MJ/Nm³)	EG (%)
<b>750</b>	2,49	23,08
<b>800</b>	3,27	34,77
<b>850</b>	4,22	52,26

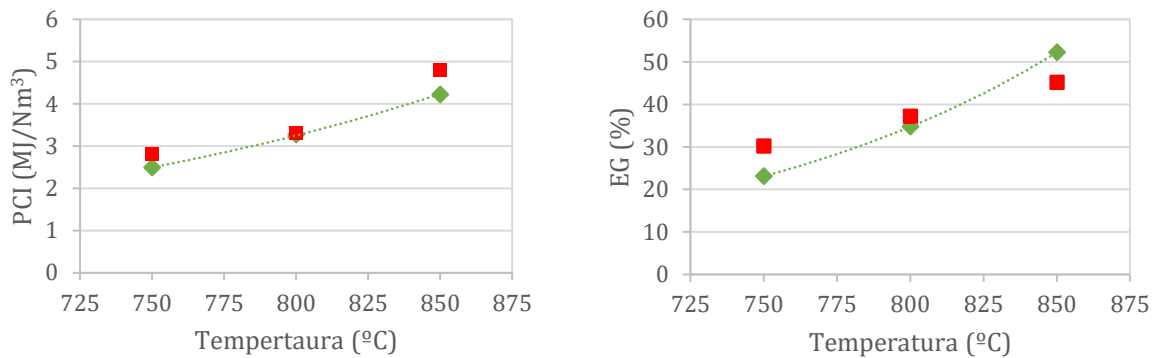


Figura 4.3. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

Para el cálculo del poder calorífico inferior del gas producto se han tenido en cuenta los valores de composición y de calor de combustión de  $H_2$ ,  $CO$  y  $CH_4$ . En la Figura 4.3 se aprecia que un incremento de la temperatura de gasificación favorece las reacciones en las que se forma  $H_2$  y  $CO$ , por lo que el PCI también aumenta.

La eficiencia de la gasificación se determina como el cociente entre la energía de los gases formados (producción de gases multiplicada por su PCI) y la energía contenida en el lodo. En la Figura 4.3 se muestra que, al incrementarse la temperatura de gasificación, la eficiencia del proceso crece debido al aumento en la producción de gases y a su mayor PCI.

De nuevo, los resultados del modelo de simulación y de los ensayos de laboratorio concuerdan bien. En ambos casos se observa la evolución creciente del PCI y de la eficiencia del proceso con la temperatura de gasificación.

#### 4.2.2. Influencia del *ratio* equivalente

El *ratio* equivalente (ER) y la temperatura de gasificación son parámetros que están muy relacionados entre sí y algunos autores estudian sus efectos conjuntamente (Doherty et al., 2009). Como se ha comentado en el apartado 3.1.3, el *ratio* equivalente se define como la relación entre la cantidad de aire introducida en el gasificador y la cantidad estequiométrica de aire requerida para la combustión completa del lodo alimentado.

Para evaluar el efecto de esta variable, se han realizado una serie de simulaciones utilizando distintos valores de ER (0,2, 0,3 y 0,4), manteniendo la temperatura de gasificación constante ( $T = 800^\circ\text{C}$ ) y utilizando aire como agente gasificante ( $S/B = 0$ ).

##### - Composición del gas

En la Tabla 4.7 se presenta la composición del gas obtenida en las simulaciones para distintos valores de ER. La evolución de las concentraciones de  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO$  y  $CO_2$  con el *ratio* equivalente se muestra en la Figura 4.4.

#### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tabla 4.7. Composición del gas para distintos valores de ER en el modelo de simulación ( $T = 800^{\circ}\text{C}$  y  $S/B = 0$ ).

Fuente: Elaboración propia

Composición gas (% v/v, base seca)				
ER	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>
0,2	13,84	4,99	8,18	13,72
0,3	10,66	3,08	8,10	13,98
0,4	8,64	2,08	8,06	14,21

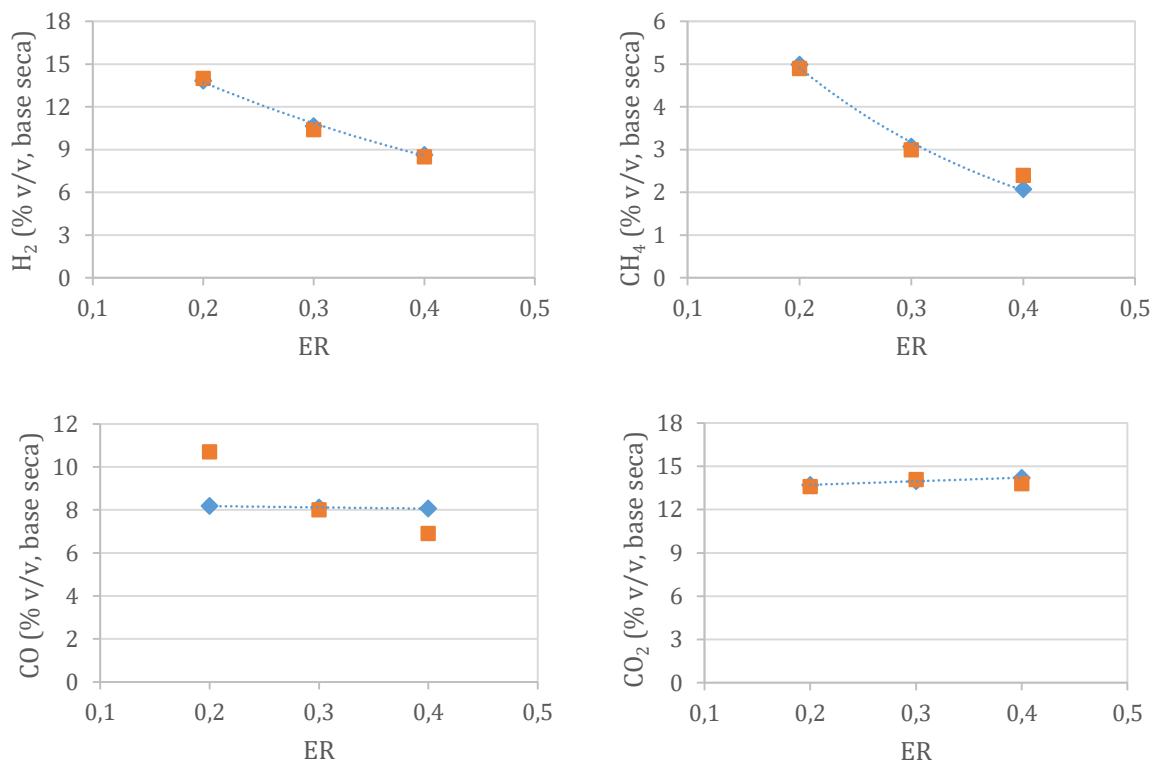


Figura 4.4. Evolución de la composición de los gases con el *ratio* equivalente. Fuente: Elaboración propia.

(♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

Un aumento del valor de ER conlleva una mayor entrada de aire y, por tanto, se incrementa la presencia de O<sub>2</sub> favoreciendo las reacciones de combustión (Ramzan et al. 2011). La producción de H<sub>2</sub> disminuye con el aumento de ER debido a una menor importancia de las reacciones de reformado y *water-gas* frente a las de combustión completa.

La concentración de CO se reduce al crecer el valor de ER. Esto corresponde a que una mayor presencia de oxígeno fomenta la oxidación total (frente a la combustión incompleta) del carbono del lodo y de parte de los gases combustibles para producir CO<sub>2</sub>, lo que explica el incremento de este compuesto en los gases (Nikoo y Mahinpey, 2008; Pliego-Bravo et al., 2014).

El CH<sub>4</sub> disminuye su concentración para valores más altos de ER ya que, al tratarse de un gas combustible, una mayor existencia de O<sub>2</sub> favorece su oxidación (De Andrés et al., 2011).

En la Figura 4.4 se observa que las estimaciones del modelo concuerdan bien con los resultados experimentales, reproduciéndose con relativa precisión la evolución de la composición del gas final con el *ratio* equivalente. La mayor diferencia se encuentra en la predicción de la concentración de CO.

- Producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

En la Tabla 4.8 se presentan los valores de producción de gases y de conversión de carbono obtenidos en las simulaciones realizadas con aire a  $T = 800^\circ\text{C}$ .

La Figura 4.5 muestra la evolución creciente de la producción de gases y de la conversión de carbono con el *ratio* equivalente, tanto para los resultados del modelo como para los de los ensayos de laboratorio.

Tabla 4.8. Producción de gases y conversión de carbono para distintos valores de ER en el modelo de simulación ( $T = 800^\circ\text{C}$  y  $S/B = 0$ ). Fuente: Elaboración propia

ER	$Y_{\text{gas}}$ ( $\text{Nm}^3/\text{kg lodo, daf}$ )	$X_c$ (%)
0,2	1,75	50,35
0,3	2,31	62,38
0,4	2,89	75,39

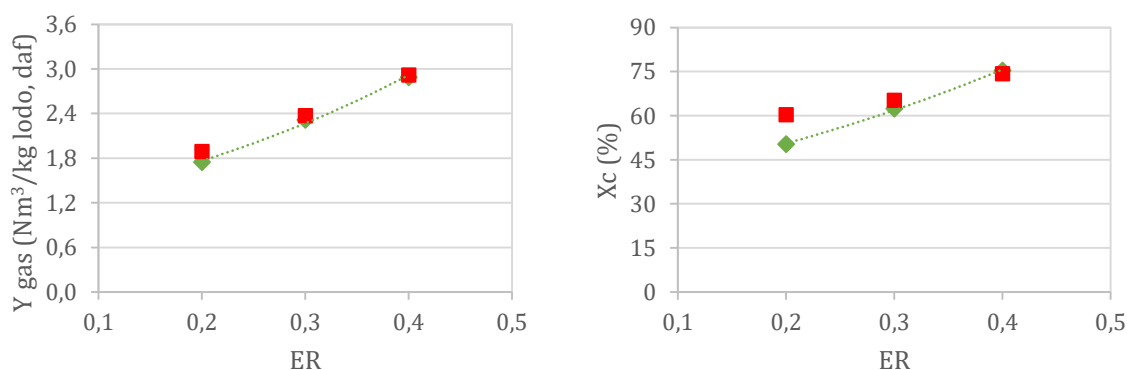


Figura 4.5. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con el *ratio* equivalente.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

Un aumento de ER supone un mayor aporte de aire y, por tanto, se incrementa la producción de gases, aunque su calidad se reduce debido a que su contenido en  $\text{H}_2$  y CO disminuye.

Un mayor volumen de oxígeno favorece las reacciones de combustión, lo que supone un aumento del consumo del C presente en el lodo y, por tanto, de la conversión de carbono (Ramzan et al., 2011).

- Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

La Tabla 4.9 presenta los valores obtenidos en las simulaciones del poder calorífico inferior (PCI) de los gases y de la eficiencia de la gasificación (EG) al variar el valor de ER.

Tabla 4.9. Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintos valores de ER en el modelo de simulación ( $T = 800^{\circ}\text{C}$  y  $S/B = 0$ ). Fuente: Elaboración propia

ER	PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	EG (%)
0,2	4,31	34,58
0,3	3,27	34,77
0,4	2,69	35,70

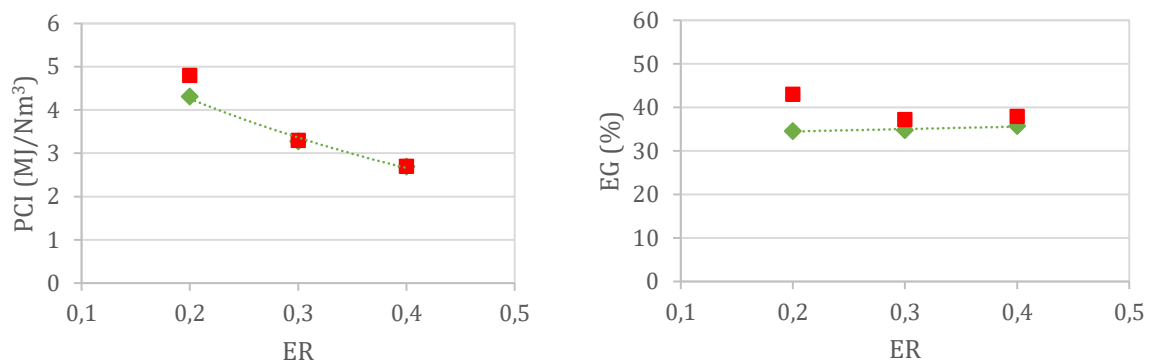


Figura 4.6. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con el *ratio* equivalente.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

Como se ha comentado anteriormente, la mayor entrada de aire en el reactor como consecuencia del aumento de ER beneficia la oxidación de parte de los gases combustibles, lo que reduce el contenido de  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$  y  $\text{CH}_4$ , con la consiguiente pérdida de poder calorífico inferior de los gases.

La eficiencia de la gasificación se ve influenciada tanto por la producción de gases (que aumenta con ER) como por el PCI (que disminuye para valores elevados de ER). Para el modelo, la eficiencia del proceso aumenta muy ligeramente con el ER. Por el contrario, esta tendencia no es tan clara en los resultados de las pruebas de laboratorio (Figura 4.6), debido al efecto contrapuesto de los dos factores antes descritos.

#### 4.2.3. Influencia del *ratio* vapor/biomasa

El agente gasificante es otro de los factores con mayor influencia en el proceso de gasificación de lodos. Para estudiar su efecto, se realizaron simulaciones utilizando sólo aire o bien mezclas de aire/vapor de agua como agente gasificante, manteniendo constante el *ratio* equivalente ( $\text{ER} = 0,3$ ) y la temperatura del proceso ( $T = 800^{\circ}\text{C}$ ). Como ya se ha mencionado en el apartado 3.1.3, el *ratio* vapor/biomasa ( $S/B$ ) es la relación entre las masas de agua y de lodo (libre de humedad y cenizas) introducidas en el reactor.

### - Composición del gas

La Tabla 4.10 presenta las concentraciones de  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO$  y  $CO_2$  en el gas obtenidas en las simulaciones. La Figura 4.7 muestra su evolución con S/B y se compara con los resultados de los ensayos de laboratorio.

Tabla 4.10. Composición del gas para distintos valores de S/B en el modelo de simulación ( $T = 800^\circ\text{C}$  y  $ER = 0,3$ ). Fuente: Elaboración propia

Composición gas (% v/v, base seca)				
S/B	$H_2$	$CH_4$	$CO$	$CO_2$
0	10,66	3,08	8,10	13,98
0,5	11,23	3,16	8,33	14,08
1	13,91	4,45	9,09	15,42

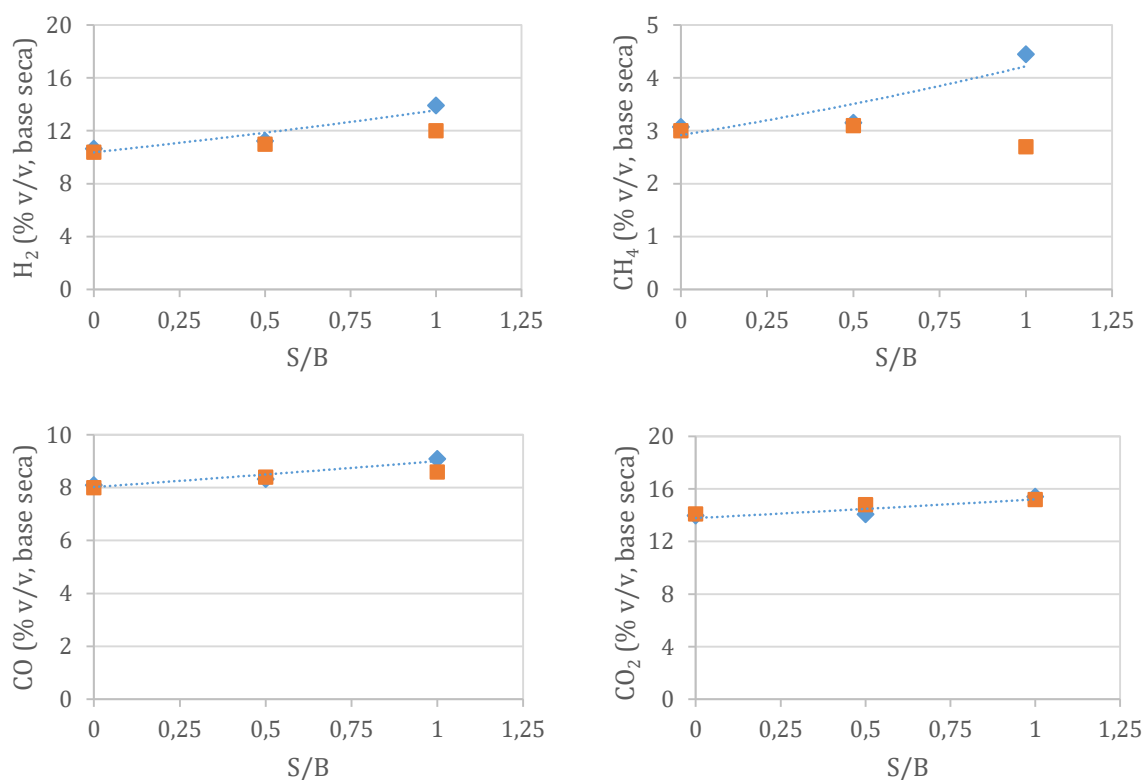


Figura 4.7. Evolución de la composición de los gases con el *ratio* vapor/biomasa. Fuente: Elaboración propia.  
(♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

La adición de vapor aumenta la producción de  $H_2$ . Esto es debido a que una mayor presencia de agua favorece las reacciones *water-gas*, *water-gas shift* y de reformado con vapor (Campoy, 2009).

La producción de  $CH_4$  se ha sobreestimado en el modelo para valores altos de S/B debido a las simplificaciones realizadas, como la no consideración de otros hidrocarburos y alquitranes. En los ensayos de laboratorio, la concentración de metano no sigue una tendencia definida,



mientras que en las simulaciones aumenta con S/B. Esto se podría explicar porque una mayor cantidad de vapor favorece la reacción de reformado, que consume  $\text{CH}_4$  y produce  $\text{H}_2$ . A su vez, este aumento de  $\text{H}_2$  fomenta la reacción de metanización, cuyo efecto es el contrario.

La producción de CO se incrementa con la adición de vapor de agua debido a las reacciones *water-gas* y de reformado. También aumenta el contenido de  $\text{CO}_2$  en el gas por la reacción *water-gas shift* (Doherty et al., 2008).

#### - Producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

La Tabla 4.11 muestra los resultados de producción de gases y conversión de carbono en las simulaciones para distintos valores de S/B. La Figura 4.8 presenta la evolución de estos parámetros y se comprueba que los valores obtenidos por el modelo explican bien los de las pruebas experimentales.

Tabla 4.11. Producción de gases y conversión de carbono para distintos valores de S/B en el modelo de simulación ( $T = 800^\circ\text{C}$  y  $\text{ER} = 0,3$ ). Fuente: Elaboración propia

S/B	$Y_{\text{gas}}$ ( $\text{Nm}^3/\text{kg lodo, daf}$ )	$X_c$ (%)
0	2,31	62,38
0,5	2,35	64,40
1	2,60	80,72

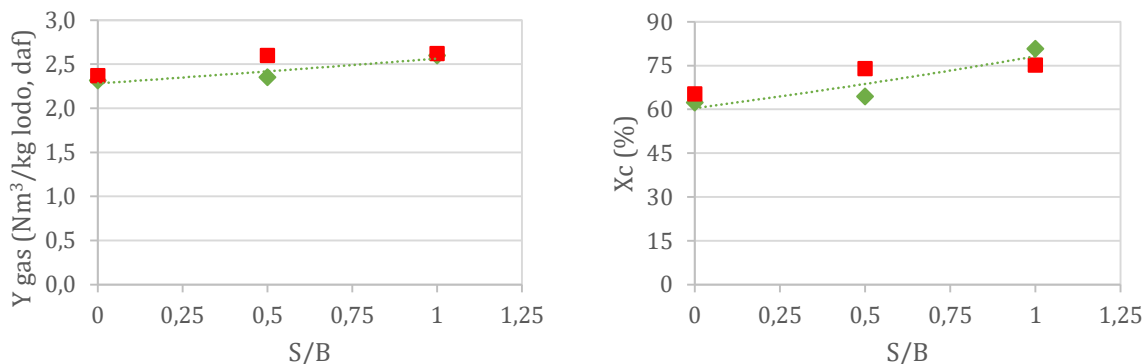


Figura 4.8. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con el *ratio* vapor/biomasa.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

El aporte de vapor de agua en el gasificador aumenta ligeramente la producción de gases según las simulaciones, lo que concuerda con los resultados experimentales. La causa es el fomento de la reacción *water-gas*, en la que reacciona el vapor de agua con el carbono del residuo, lo que produce una mayor cantidad de  $\text{H}_2$  y CO. Esto también explica el aumento de la conversión de carbono a mayor S/B.

- Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

La Tabla 4.12 presenta los resultados de las simulaciones para el poder calorífico inferior de los gases producidos y la eficiencia de la gasificación. En la Figura 4.9 se observa una tendencia positiva para los dos parámetros al añadir vapor en el reactor, la cual se observa también ligeramente en los resultados experimentales.

Tabla 4.12. Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintos valores de S/B en el modelo de simulación ( $T = 800^{\circ}\text{C}$  y  $ER = 0,3$ ). Fuente: Elaboración propia

S/B	PCI ( $\text{MJ}/\text{Nm}^3$ )	EG (%)
0	3,27	34,77
0,5	3,39	36,60
1	4,24	50,62

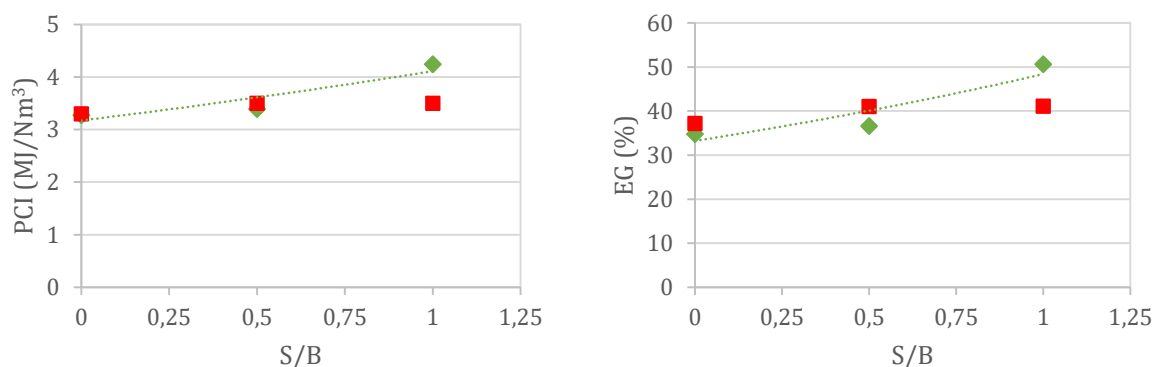


Figura 4.9. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con el *ratio* vapor/biomasa. Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

El PCI de los gases aumenta en el rango de S/B considerado debido a la mayor producción de los gases combustibles  $\text{H}_2$  y  $\text{CO}$  en presencia de vapor de agua.

El hecho de que tanto la producción de gases como su PCI sean mayores cuando se introduce vapor en el reactor genera un aumento del valor de la eficiencia de gasificación con S/B. El modelo reproduce bien los valores experimentales, si bien los resultados simulados se desvían más de los obtenidos en el laboratorio a  $S/B = 1$ , en gran medida, como consecuencia de la disparidad detectada en la simulación del  $\text{CH}_4$ .

#### 4.2.4. Influencia de la temperatura con inyección de vapor

Los resultados mostrados en el apartado 4.2.3 se han obtenido a una temperatura de  $800^{\circ}\text{C}$ . Sin embargo, la temperatura es un factor muy importante cuando se introduce vapor en el proceso de gasificación (Nikoo y Mahinpey, 2008).

Para estudiar la influencia de la temperatura del proceso cuando se utiliza una mezcla de aire/vapor de agua como agente gasificante se han realizado una serie de simulaciones a

#### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

distintas temperaturas (750°C, 800°C y 850°C), manteniendo el *ratio* equivalente constante (ER = 0,3) para un S/B = 0,5.

##### - Composición del gas

La Tabla 4.13 presenta la composición de los gases obtenida en las simulaciones con vapor de agua a diferentes temperaturas.

Tabla 4.13. Composición del gas para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación (ER = 0,3 y S/B = 0,5). Fuente: Elaboración propia

Composición gas (% v/v, base seca), S/B = 0,5				
Temperatura (°C)	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>
750	6,93	3,02	4,04	15,09
800	11,23	3,16	8,33	14,08
850	16,04	2,90	14,67	11,77

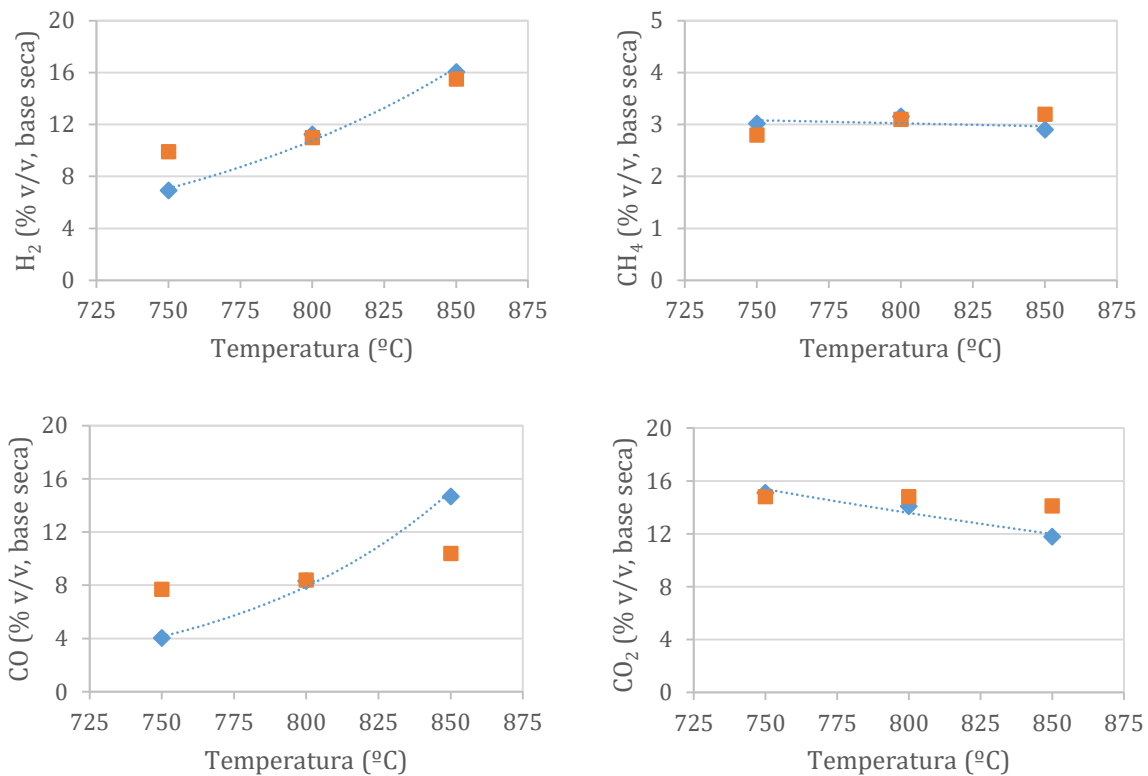


Figura 4.10. Evolución de la composición de los gases con la temperatura y S/B = 0,5.

Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

La Figura 4.10 muestra que un aumento en la temperatura de gasificación fomenta la formación de H<sub>2</sub> y CO cuando se gasifica con una mezcla de aire y vapor de agua. Sin embargo, decrece la concentración de CO<sub>2</sub> en el gas. Esto se debe a que las reacciones de Boudouard, *water-gas* y reformado con vapor son endotérmicas y a elevadas temperaturas se favorece la reacción directa (Campoy, 2009).

- Producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

La Tabla 4.14 presenta los valores de producción de gases y conversión de carbono obtenidos en las simulaciones con vapor de agua a diferentes temperaturas.

Tabla 4.14. Producción de gases y conversión de carbono para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación ( $ER = 0,3$  y  $S/B = 0,5$ ). Fuente: Elaboración propia

Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ), $S/B = 0,5$	$Y_{\text{gas}}$ ( $\text{Nm}^3/\text{kg lodo, daf}$ )	$X_c$ (%)
750	2,00	49,72
800	2,35	64,40
850	2,85	85,56

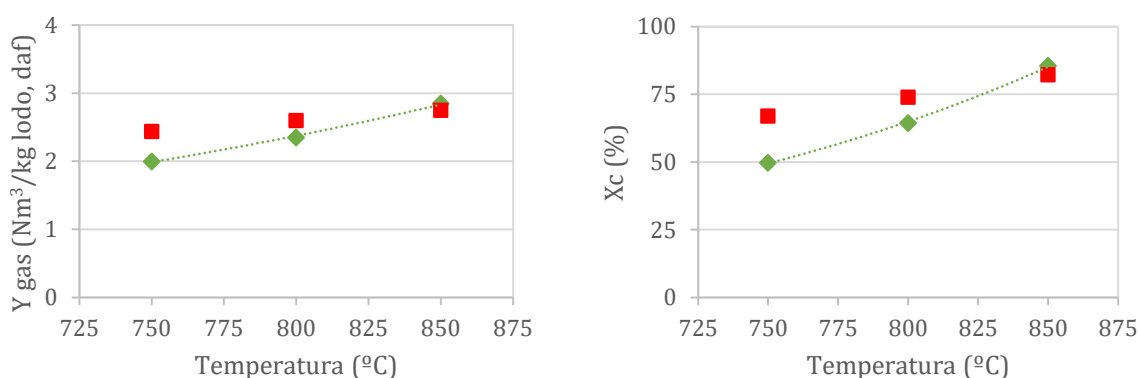


Figura 4.11. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura y  $S/B = 0,5$ . Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

La Figura 4.11 muestra la variación creciente con la temperatura de la producción de gases y de la conversión de carbono, tanto para las simulaciones como para las pruebas de laboratorio.

- Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

La Tabla 4.15 presenta los resultados de PCI de los gases y la eficiencia de la gasificación obtenidos en las simulaciones con vapor de agua a diferentes temperaturas.

Tabla 4.15. Poder calorífico inferior del gas y eficiencia de la gasificación para distintas temperaturas con inyección de vapor en el modelo de simulación ( $ER = 0,3$  y  $S/B = 0,5$ ). Fuente: Elaboración propia

Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ), $S/B = 0,5$	PCI ( $\text{MJ}/\text{Nm}^3$ )	EG (%)
750	2,34	21,42
800	3,39	36,60
850	4,62	60,38

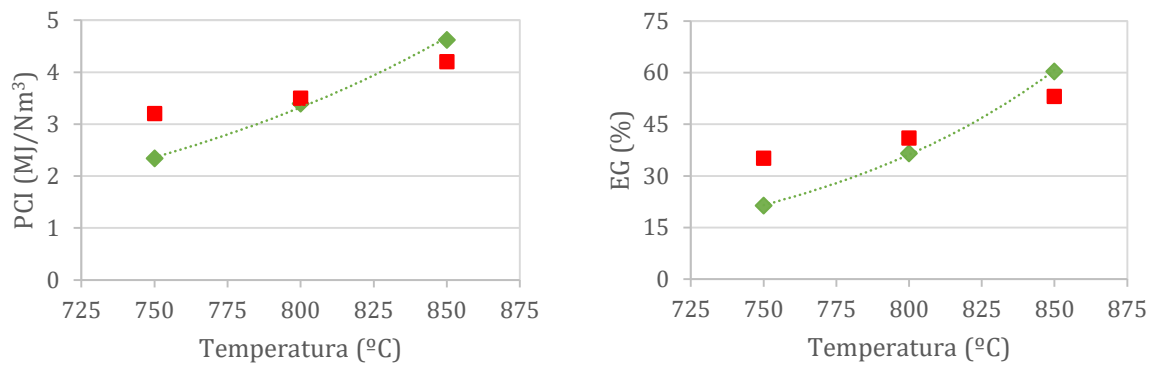


Figura 4.12. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura y S/B = 0,5. Fuente: Elaboración propia. (♦ Modelo Aspen Plus; ■ Resultados experimentales)

En la Figura 4.12 se observa que, tanto para las simulaciones como para los ensayos, el PCI de los gases y la eficiencia de la gasificación aumentan con la temperatura cuando se introduce vapor de agua. Esto es debido a que las reacciones endotérmicas *water-gas* y de reformado con vapor generan más cantidad de gases combustibles a temperaturas más altas.

#### **Comparación de las simulaciones con aire y con mezcla de aire/vapor**

Las simulaciones anteriores indican la misma tendencia en los resultados cuando se gasifica con aire que cuando se introduce vapor en el gasificador al variar la temperatura del proceso. Por ello, las Figuras 4.13, 4.14 y 4.15 comparan los valores obtenidos a distintas temperaturas y distintos valores de S/B.

La concentración de H<sub>2</sub> y CO aumenta tanto con la temperatura como con la cantidad de vapor introducida, mientras que el CO<sub>2</sub> disminuye al aumentar ambos factores. El resto de parámetros (producción de gases, conversión de carbono, poder calorífico inferior y eficiencia de la gasificación) evolucionan de la misma manera, aumentando su valor al elevarse tanto la temperatura como la relación vapor/biomasa.

La máxima concentración de H<sub>2</sub> (16%) y de CO (15%) se consigue utilizando mezclas aire/vapor como agente gasificante a una temperatura de 850°C. Para esas mismas condiciones, se alcanzan los valores más elevados de conversión de carbono (86%), poder calorífico inferior de los gases (5%) y eficiencia energética del proceso (60%).

## - Composición del gas

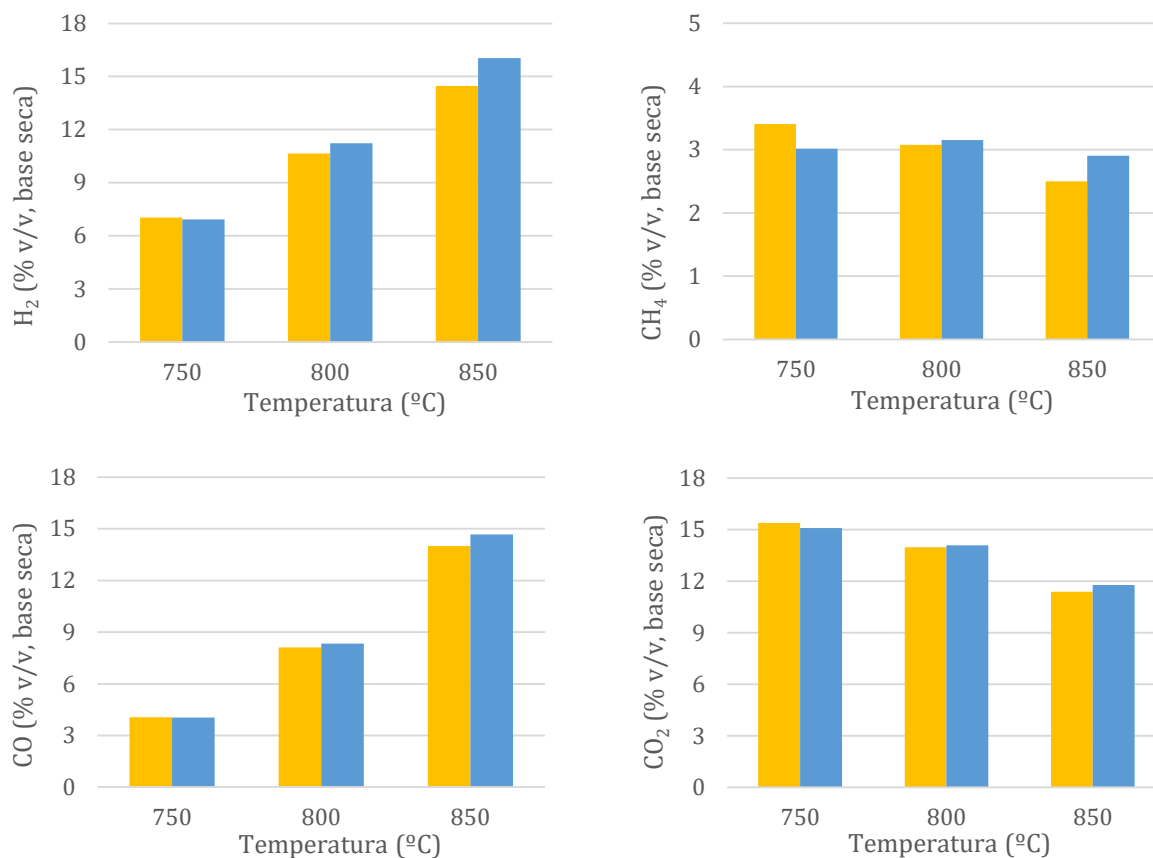


Figura 4.13. Evolución de la composición de los gases con la temperatura para distintos valores de S/B. Fuente: Elaboración propia. (■ S/B = 0; ■ S/B = 0,5)

## - Producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

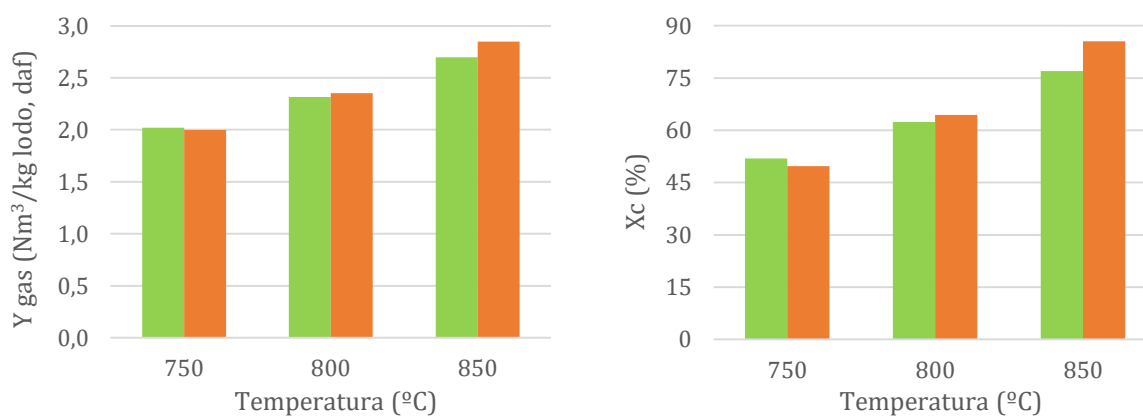


Figura 4.14. Evolución de la producción de gases y de la conversión de carbono con la temperatura para distintos valores de S/B. Fuente: Elaboración propia. (■ S/B = 0; ■ S/B = 0,5)

- Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

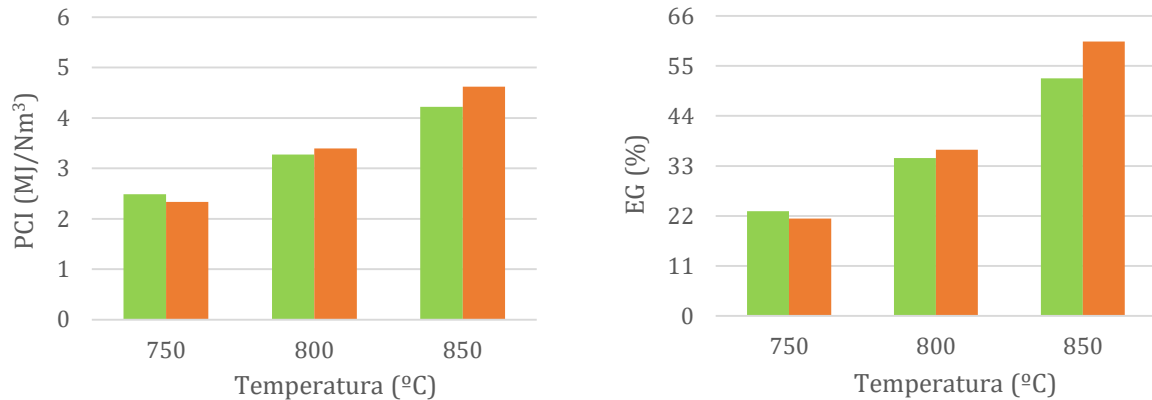


Figura 4.15. Evolución del poder calorífico inferior y de la eficiencia de la gasificación con la temperatura para distintos valores de S/B. Fuente: Elaboración propia. (■ S/B = 0; ■ S/B = 0,5)

### 4.3. CONDICIONES DE OPERACIÓN ÓPTIMAS

Las simulaciones anteriores permiten establecer las condiciones de operación que maximizan la calidad el gas de síntesis y la eficiencia del proceso de gasificación.

- Composición del gas

La concentración de H<sub>2</sub> y CO aumenta a altas temperaturas, a las cuales se favorecen las reacciones de Boudouard, metanización inversa, *water-gas* y reformado.

La formación de H<sub>2</sub> y CO se incrementa cuando hay poco oxígeno en el gasificador (valores bajos de ER), pues se fomentan las reacciones endotérmicas del proceso frente a las de combustión.

La inyección de vapor de agua aumenta la proporción de H<sub>2</sub> y CO en el gas de síntesis, al favorecerse las reacciones *water-gas*, *water-gas shift* y de reformado con vapor.

- Producción de gases ( $Y_{\text{gas}}$ ) y conversión de carbono ( $X_c$ )

Un aumento de la temperatura genera una mayor producción de gases e incrementa la conversión de carbono en el proceso de gasificación.

Una mayor cantidad de aire presente en el gasificador (valores altos de ER) aumenta la producción de gases y mejoran la conversión del carbono al favorecerse las reacciones de oxidación.

La inyección de vapor también incrementa la cantidad de gases y la conversión de carbono al fomentarse la reacción *water-gas* y las reacciones de reformado.

##### - Poder calorífico inferior (PCI) y eficiencia de la gasificación (EG)

Temperaturas de gasificación elevadas favorecen la formación de gases combustibles, por lo que el poder calorífico inferior aumenta y, en consecuencia, la eficiencia energética del proceso.

Valores bajos de ER producen menor cantidad de gases al introducirse menos aire, pero a su vez aumenta la concentración de gases combustibles mejorando el PCI. Ambos factores contrapuestos disminuyen el efecto de este parámetro en la eficiencia de gasificación.

La inyección de vapor incrementa la formación de  $H_2$  y  $CO$ , lo que mejora el poder calorífico inferior de los gases y la eficiencia energética del proceso.

##### - Condiciones de operación óptimas

A la vista de los resultados anteriores, las condiciones óptimas de operación para el modelo de simulación (dentro del rango estudiado) se dan cuando se introduce vapor de agua en el reactor ( $S/B = 0,5$ ) a temperaturas elevadas ( $T = 850\text{ }^{\circ}C$ ) y con un *ratio* equivalente intermedio ( $ER = 0,3$ ), ya que trabajar a ER elevados (conversiones de carbono altas) tiene un efecto negativo sobre el PCI de los gases. Estos resultados coinciden con los obtenidos en los ensayos de laboratorio (De Andrés, 2010).

#### **4.4. CONSIDERACIONES EN EL ÁMBITO LEGAL, ÉTICO, MEDIOAMBIENTAL Y SOCIOECONÓMICO**

En este apartado se realiza una identificación y reflexión general sobre los aspectos de responsabilidad medioambiental, socioeconómica, legal, ética y profesional relacionados con el presente proyecto.

##### - Responsabilidad medioambiental

El desarrollo de un modelo de gasificación de lodos permite mejorar el conocimiento existente sobre esta tecnología. De esta forma, se fomenta la valorización energética de estos residuos reduciendo, al mismo tiempo, su disposición final en vertederos, los cuales ocupan grandes superficies de terreno. Además, se evitan otros efectos negativos asociados al vertido de residuos, entre los que destacan la generación de lixiviados, que pueden contaminar suelos y acuíferos, la generación de malos olores y de gases de efecto invernadero, principalmente metano y  $CO_2$ .

El gas de síntesis producido en la gasificación de lodos es una alternativa potencial de origen renovable a los combustibles fósiles para la generación de energía térmica y/o eléctrica, consiguiendo ralentizar el progresivo agotamiento de las reservas de estos últimos. Además, se minimizan parte de los impactos ambientales asociados al consumo de los mismos.

La gasificación se presenta como uno de los procesos termoquímicos más sostenibles de aprovechamiento energético de los lodos, frente a otras opciones como la incineración. Esto se debe a que en la gasificación se trabaja en condiciones subestequiométricas, lo que reduce el



caudal de gases a tratar (mejorando, además, la economía del proceso) y las emisiones a la atmósfera de gases como CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> y SO<sub>x</sub>.

##### - Responsabilidad socioeconómica

El uso de modelos permite estudiar, de forma simplificada, procesos complejos. Son, por tanto, útiles para facilitar el diseño de equipos y contribuir a la optimización de las condiciones de operación. Mediante el empleo del *software* de simulación, el modelo es capaz de representar el comportamiento real de una planta de gasificación con precisión, fiabilidad y a bajo coste. Esto supone un atractivo avance tecnológico, que fomenta el progreso industrial y el desarrollo de la sociedad.

La flexibilidad de adaptación y escalado de los modelos de simulación puede ayudar en la implantación y puesta en marcha de una planta de gasificación a escala industrial con óptimo rendimiento, facilitando la estabilidad del empleo y el consiguiente beneficio económico a nivel local.

Como se ha comentado anteriormente, el proceso de gasificación de lodos consigue reducir la cantidad de residuos que se destinan a vertedero y, por tanto, los problemas de salud pública que su eliminación conlleva.

Otra ventaja importante del uso lodos para la producción de energía mediante gasificación es su alta disponibilidad durante todo el año, lo que puede garantizar el suministro energético de países como España, disminuyendo su dependencia de países productores de petróleo.

Además, el gas de síntesis final del proceso de gasificación puede utilizarse para la obtención de productos químicos orgánicos de alto valor añadido y combustibles líquidos, lo que reduce el coste asociado a la adquisición de otras materias primas para ese mismo objetivo.

La gasificación de lodos es ventajosa frente a otros procesos de conversión termoquímica, como la incineración, la cual cuenta con una fuerte oposición social.

##### - Responsabilidad ética y profesional

Este proyecto se ha basado en los principios básicos del código ético universal de honestidad, competencia, responsabilidad e independencia. Se han puesto de manifiesto valores de veracidad, calidad, capacidad técnica, autonomía, integridad y respeto al derecho de propiedad intelectual.

Dentro del marco profesional de la ingeniería, este proyecto responde a la necesidad del impulso de la actividad científica y técnica. Se han llevado a cabo tareas de diseño e investigación, contrastando el modelo creado con datos reales basados en la experimentación para su evaluación. Se han aplicado los conocimientos técnicos sobre simulación de procesos y otras disciplinas adquiridos en la universidad. Finalmente, se ha desarrollado un análisis metodológico y una planificación de etapas, en términos de objetivos, recursos, costes y tiempos. Se ha puesto en valor la habilidad para resolver problemas y la actitud de aprendizaje para crear un modelo que representa la realidad de forma simplificada y proyectar los resultados para hacerlos accesibles a la sociedad.

- Responsabilidad legal

Para la realización de este proyecto se han empleado diversos programas informáticos sometidos a licencias de *software* en propiedad de empresas privadas del sector tecnológico. En todo momento se han cumplido los términos y condiciones establecidos dentro de sus cláusulas, de acuerdo con la legalidad vigente en relación a los derechos de propiedad intelectual.

El modelo de simulación de la gasificación de lodos se ha diseñado con el *software* de procesos químicos Aspen Plus v8.6 desarrollado por AspenTech. El programa se ha utilizado bajo la licencia académica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

El desarrollo de la programación temporal se ha llevado a cabo con la versión de evaluación del *software* de administración de proyectos Project 2013 creado por Microsoft, vigente por un periodo de 60 días desde su instalación.

Para la elaboración del documento y la realización de los cálculos y gráficas del proyecto se ha empleado el paquete Office Hogar y Estudiante 2013 de Microsoft, que incluye los programas Word, Excel y PowerPoint, bajo una licencia doméstica de uso comercial con una duración de 365 días desde su instalación.

## 5. CONCLUSIONES

1. El modelo de simulación desarrollado con Aspen Plus reproduce razonablemente bien los resultados de los ensayos de laboratorio del proceso de gasificación de lodos. Los valores obtenidos en las simulaciones y en las pruebas experimentales muestran buena concordancia en términos de composición (concentración de  $H_2$ ,  $CO$  y  $CO_2$ ), rendimiento, poder calorífico inferior (PCI) de los gases generados, conversión de carbono y eficiencia energética de la gasificación (EG).
2. La mayor diferencia encontrada entre las simulaciones y los resultados experimentales ha sido en la estimación de la concentración de  $CH_4$  en el gas final. Esto es debido a las simplificaciones efectuadas en el modelo, como son no incluir la producción de otros hidrocarburos y no tener en cuenta la formación de alquitranes. A pesar de las diferencias existentes, la estimación de otros parámetros (producción de los gases y su PCI, conversión de carbono y eficiencia de gasificación) no se ha visto afectada de forma importante debido a que el metano es un componente minoritario en el gas de síntesis.
3. La inyección de vapor es una variable difícil de modelar, por lo que ha sido necesario modificar las reacciones y la aproximación de las temperaturas en el reactor “RGibbs” del modelo de simulación con Aspen Plus. A pesar de estas variaciones, el modelo realiza estimaciones más precisas cuando se utiliza exclusivamente aire como agente gasificante.
4. De acuerdo con los resultados obtenidos en las simulaciones, la temperatura, el *ratio* equivalente (ER) y el *ratio* vapor/biomasa (S/B) son variables que influyen significativamente en el proceso de gasificación de lodos de depuradoras. De esta manera, mayores temperaturas mejoran tanto la cantidad como la calidad del gas de síntesis formado (mayor concentración de  $H_2$  y  $CO$ ), aumentando la conversión de carbono, el PCI de los gases y la eficiencia de gasificación.
5. En las simulaciones se observa que un incremento en el *ratio* equivalente (ER) aumenta la producción de gases al introducirse más aire en el reactor, pero empeora su calidad al formarse una mayor cantidad de  $CO_2$  y menor de  $H_2$  y  $CO$ . Esto reduce el PCI de los gases e impide que la eficiencia energética del proceso se vea favorecida.
6. Según los resultados del modelo, se advierte que la introducción de vapor de agua como agente gasificante aumenta la producción de  $H_2$  y mejora el poder calorífico inferior del gas, aumentando también la conversión de carbono y la eficiencia del proceso. Este incremento es mayor cuanto más elevada sea la temperatura de gasificación.
7. Se concluye que las condiciones óptimas de operación que estima el modelo (dentro del rango estudiado para las variables consideradas) se producen cuando la temperatura es más elevada ( $T = 850\text{ }^{\circ}C$ ) con adición de vapor de agua como agente gasificante y para un *ratio* equivalente de 0,3. Sin embargo, antes de poder generalizar esta conclusión, sería necesario realizar experimentos autotérmicos con el fin de observar si esa temperatura es compatible con la introducción de las citadas cantidades de vapor de agua en procesos de gasificación a mayor escala.
8. A la luz de los resultados obtenidos, cabe destacar la gran utilidad de la modelización de la gasificación. El modelo facilita la comprensión de este complejo proceso y reproduce el comportamiento del sistema de forma eficaz. La flexibilidad del *software* de simulación Aspen

## 5. CONCLUSIONES

---

Plus permite adaptar el sistema a distintas variables y condiciones de operación, tales como temperatura, presión, caudales y composiciones de alimentación. El modelo es capaz de estimar la composición del gas de síntesis y ayuda en la optimización de las condiciones de funcionamiento. Por último, cabe resaltar la importancia del uso de modelos en el diseño y escalado de los equipos de gasificación de forma sencilla y a bajo coste.

## 6. LÍNEAS FUTURAS

A continuación se recogen distintas líneas de trabajo que sirven de complemento a la labor de investigación realizada hasta la fecha en el Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente en materia de gasificación:

1. En este proyecto se ha trabajado entre los límites de temperaturas  $T = 750^{\circ}\text{C} - 850^{\circ}\text{C}$ , *ratio* equivalente  $ER = 0,2 - 0,4$  y *ratio* vapor/biomasa  $S/B = 0 - 1$ . Estos rangos podrían ser ampliados en futuras investigaciones para un estudio más profundo de la evolución de los parámetros del proceso, lo cual serviría para determinar con más detalle las condiciones óptimas de operación y las restricciones de la gasificación de lodos. Igualmente, se podría analizar el efecto de otros factores sobre los productos de la gasificación, como son el contenido en humedad del lodo, la distribución del tamaño de partícula del mismo, el uso de catalizadores y la temperatura de precalentamiento del agente gasificante.
2. Para mejorar el comportamiento del modelo presentado, sería aconsejable tener en cuenta la producción de otros hidrocarburos distintos del metano, como son el etano o el etileno. Además, se podrían modelar los alquitranes formados como productos de no-equilibrio en el reactor.
3. Sería conveniente elaborar un modelo cinético que sustituyera al reactor de equilibrio “RGibbs” para tener en cuenta los mecanismos y las constantes de velocidad de las reacciones químicas del proceso de gasificación. Esto lograría mejores predicciones del modelo de simulación. Para ello, sería necesaria la realización de experimentos con recopilación de perfiles axiales y longitudinales de temperatura y de composición de los gases dentro del gasificador, distinguiendo entre las zonas del lecho y del *freeboard*.

## 7. PLANIFICACIÓN

En este apartado, se desglosan las actividades involucradas en la realización de este proyecto y se presenta la duración en el tiempo de cada una de ellas. Para mostrar la programación temporal de las tareas, se ha utilizado la versión de evaluación del *software* de administración de proyectos Project 2013, desarrollado por Microsoft.

### 7.1. ACTIVIDADES

En la Tabla 7.1, se descompone el proyecto en las distintas actividades llevadas a cabo y se especifica el tiempo empleado en cada una. Además, se muestra la fecha de inicio y final de las tareas y subtareas, así como la relación de precedencia que existe entre ellas.

Tabla 7.1. Principales actividades desarrolladas durante la realización del proyecto. Fuente: Elaboración propia

Nº tarea	Nombre tarea	Duración	Fecha inicial	Fecha final	Predecesoras
1	Proyecto Fin de Carrera	175 días	14/09/2015	06/03/2016	
2	Documentación	21 días	14/09/2015	04/10/2015	
3	Objetivos	7 días	05/10/2015	11/10/2015	2
4	Introducción	21 días	12/10/2015	01/11/2015	
5	Antecedentes	14 días	12/10/2015	25/10/2015	3
6	Motivación	7 días	26/10/2015	01/11/2015	5
7	Metodología	35 días	02/11/2015	06/12/2015	
8	Ensayos previos	7 días	02/11/2015	08/11/2015	6
9	Modelo Aspen Plus	28 días	09/11/2015	06/12/2015	8
10	Resultados	28 días	07/12/2015	03/01/2016	
11	Validación modelo	7 días	07/12/2015	13/12/2016	9
12	Análisis sensibilidad	14 días	14/12/2015	27/12/2015	11
13	Condiciones óptimas	7 días	28/12/2015	03/01/2016	12
14	Conclusiones	4 días	04/01/2016	07/01/2016	13
15	Líneas futuras	3 días	08/01/2016	10/01/2016	14
16	Bibliografía	4 días	11/01/2016	14/01/2016	15
17	Abreviaturas	3 días	15/01/2016	17/01/2016	16
18	Resumen	5 días	18/01/2016	22/01/2016	17
19	Agradecimientos	1 día	23/01/2016	23/01/2016	18
20	Portada	1 día	24/01/2016	24/01/2016	19
21	Planificación	4 día	25/01/2016	28/01/2016	20
22	Presupuesto	3 día	29/01/2016	31/01/2016	21
23	Correcciones	14 días	01/02/2016	14/02/2016	22
24	Índice	21 días	15/02/2016	06/03/2016	
25	Índice figuras	7 días	15/02/2016	21/02/2016	23
26	Índice tablas	7 días	22/02/2016	28/02/2016	25
27	Índice general	7 días	29/02/2016	06/03/2016	26

### 7.2. DIAGRAMA DE GANTT

El objetivo de este cronograma es exponer, de forma visual, el tiempo de dedicación a cada una de las diferentes actividades a lo largo de la duración total del proyecto. En la Figura 7.1, se representa el diagrama de Gantt.

## 7. PLANIFICACIÓN

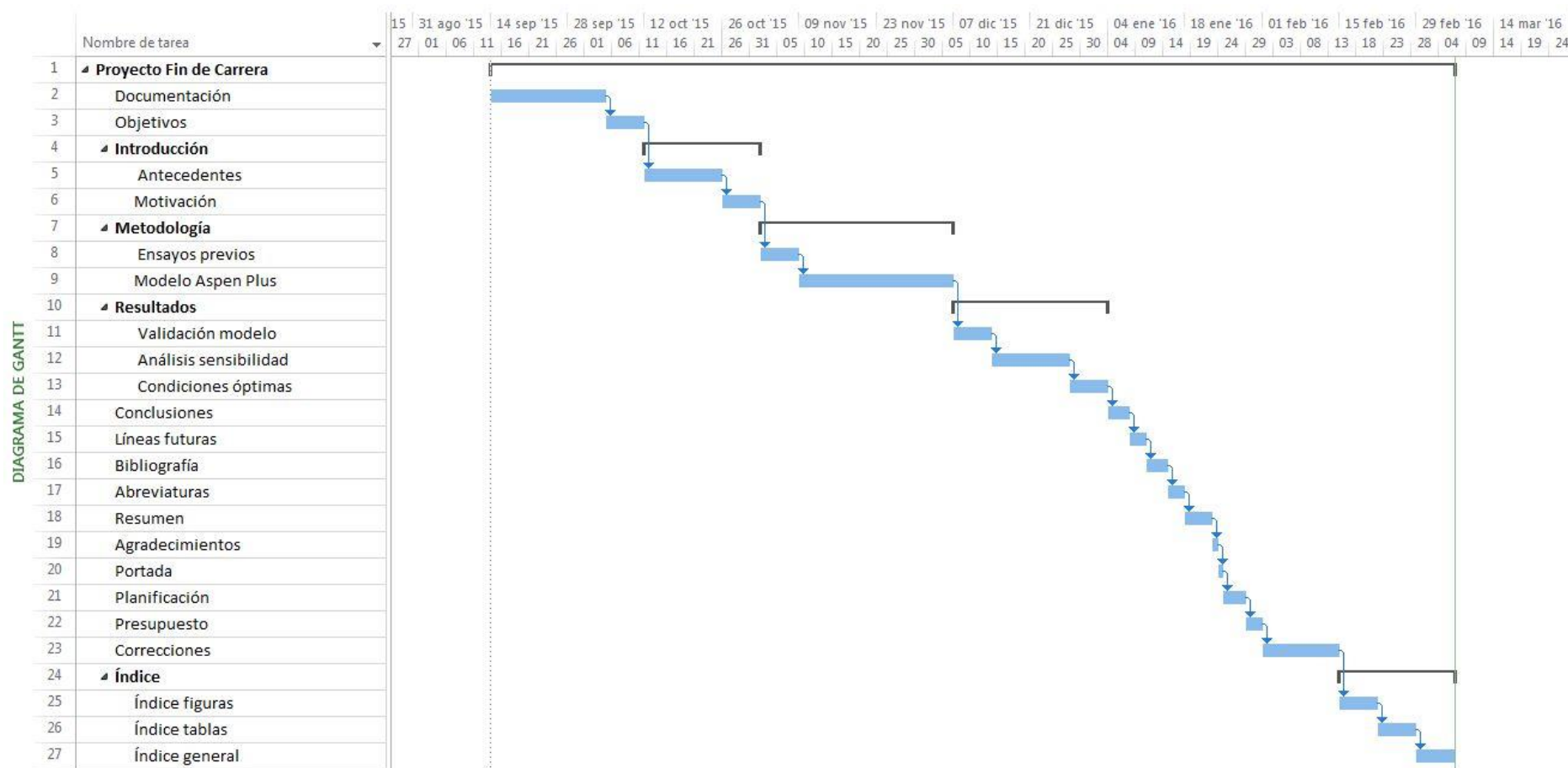


Figura 7.1. Diagrama de Gantt del proyecto. Fuente: Elaboración propia con Project 2013

## 8. PRESUPUESTO

Bajo estas líneas, se ha desarrollado la evaluación económica que implica la realización del presente Proyecto Fin de Carrera.

En el presupuesto se detallan los costes relacionados con los materiales utilizados y las horas del alumno y de los tutores dedicadas a la elaboración de este trabajo.

- Materiales utilizados: Se incluyen tanto el *hardware* como el *software* empleados.

\**Hardware*: Ordenador portátil TOSHIBA P50-C-11J y memoria USB 3.0 Verbatim 16 Gb.

\**Software*: Licencia Aspen Plus v8.6 y paquete Office Hogar y Estudiante 2013.

- Horas de trabajo: Se engloba tanto el tiempo del alumno como el de los dos tutores.

\**Alumno*: Se ha estimado una media de 25 horas semanales dedicadas durante veinticinco semanas, obteniendo un total de 625 horas.

\**Tutores*: Los dos tutores han invertido 35 horas cada uno, lo que hace un total de 70 horas.

Tabla 8.1. Presupuesto del Proyecto Fin de Carrera. Fuente: Elaboración propia

CONCEPTO	PRECIO UNITARIO (€)	NÚMERO DE UNIDADES	TOTAL (€)
<b>Materiales</b>			
Ordenador portátil TOSHIBA	999	1	999
Memoria USB 16 Gb Verbatim	7	1	7
Licencia Aspen Plus v8.6	2.300	1	2.300
Office 2013	119	1	119
TOTAL MATERIALES			3.425
<b>Horas de trabajo</b>			
Horas de trabajo del alumno	10	625	6.250
Horas de trabajo de los tutores	60	70	4.200
TOTAL HORAS DE TRABAJO			10.450
<b>TOTAL PROYECTO</b>			<b>13.875</b>

Por tanto, el coste asociado a la realización de este Proyecto Fin de Carrera representa un total de **13.875 €**, impuestos incluidos.



## **ABREVIATURAS Y ACRÓNIMOS**

*daf*: *Dry and ash free*, libre de humedad y cenizas.

EDAR: Estación depuradora de aguas residuales.

EG: Eficiencia de gasificación, es el cociente entre el poder calorífico inferior de los gases producidos y el calor calorífico inferior de los lodos introducidos.

ER: *Ratio* equivalente, es la relación entre la masa de aire introducido en el reactor y la masa de aire estequiométrica necesaria para la combustión completa del lodo.

IDAE: Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía.

IGCC: Gasificación integrada en ciclo combinado.

IGT: *Institute of Gas Technology*.

MAGRAMA: Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente.

MET: *Metric Engineering System*, sistema métrico de ingeniería.

MIT: Instituto Tecnológico de Massachusetts.

PCI: Poder calorífico inferior, es el calor realmente aprovechable, es decir, el producido sin tener en cuenta la energía de la condensación del agua.

PCS: Poder calorífico superior, es el calor verdaderamente producido en una reacción de combustión.

PNIR: Plan Nacional Integrado de Residuos.

S/B: *Ratio* vapor/biomasa, es el cociente entre las masas de agua y de lodo introducidas en el reactor.

SM: Modo secuencial-modular de Aspen Plus.

X<sub>c</sub>: Conversión del carbono, cociente entre el peso del carbono presente en los gases de gasificación y peso del carbono introducido en el gasificador.

Y<sub>gas</sub>: Producción de gases (Nm<sup>3</sup>/kg lodo, *daf*).

**BIBLIOGRAFÍA**

- Abuadala, A.; Dincer, I.: "Exergoeconomic analylis of hybrid system based on steam biomass gasification products for hydrogen production". *International Journal of Hydrogen Energy*. Vol. 36 (2011), pág. 12780-12793.
- Ahmed, T. Y.; Ahmad, M. M.; Yusup, S.; Inayat, A.; Khan, Z.: "Mathematical and computational approaches for design of biomass gasification for hydrogen production: A review". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Vol. 16 (2012), pág. 2304-2315.
- Beheshti, S. M.; Ghassemi, H.; Shahsavan-Markadeh, R.: "Process simulation of biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor". *Energy Conversion and Management*. Vol. 94 (2015), pág. 345-352.
- Bridgwater, A. V.: "Renewable fuels and chemicals by thermal processing of biomass". *Chemical Engineering Journal*. Vol. 91 (2003), pág. 87-102.
- Campoy, M.: "Gasificación de biomasa y residuos en lecho fluidizado: Estudios en planta piloto". Directores: A. Gómez-Barea, P. Ollero. Tesis Doctoral (2009). Escuela Técnica Superior de Ingenieros. Universidad de Sevilla.
- Corella, J.; Sanz, A.: "Modeling circulating fluidized bed biomass gasifiers. A pseudo-rigorous model for stationary state". *Fuel Processing Technology*. Vol. 86 (2005), pág. 1021-1053.
- De Andrés, J. M.: "Gasificación de lodos de estaciones depuradoras de aguas residuales urbanas (EDAR)". Directores: M. E. Rodríguez, A. Narros. Tesis Doctoral (2010). Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid.
- De Andrés, J. M.; Narros, A.; Rodríguez, M. E.: "Behaviour of dolomite, olivine and alumina as primary catalysts in air-steam gasification of sewage sludge". *Fuel*. Vol. 90 (2011), pág. 521-527.
- De Andrés, J. M.; Narros, A.; Rodríguez, M. E.: "Air-steam gasification of sewage sludge in a bubbling bed reactor: Effect of alumina as a primary catalyst". *Fuel Processing Technology*. Vol. 92 (2011), pág. 433-440.
- Dogru, M.; Midilli, A.; Howarth, C. R.: "Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis". *Fuel Processing Technology*. Vol. 75 (2002), pág. 55-82.
- Doherty, W.; Reynolds, A.; Kennedy, D.: "Simulation of a Circulating Fluidised Bed Biomass Gasifier Using ASPEN Plus: A Performance Analysis". A. Ziebig, Z. Kolenda, W. Stanek (Eds). *XXI International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems*, pág. 1241-1248. Krakow, Poland, 2008.
- Doherty, W.; Reynolds, A.; Kennedy, D.: "The effect of air preheating in a biomass CFB gasifier using Aspen Plus simulation". *Biomass and Bioenergy*. Vol. 33 (2009), pág. 1158-1167.

- Doherty, W.; Reynolds, A.; Kennedy, D.: “Computer simulation of biomass gasification-solid oxide fuel cell power system using Aspen Plus”. *Energy*. Vol. 35 (2010), pág. 4545-4555.
- Doherty, W.; Reynolds, A.; Kennedy, D.: “Aspen plus simulation of biomass gasification in a steam blown dual fluidised bed”. Capítulo: *Materials and processes for energy: communicating current research and technological developments*. A. Méndez-Vilas (Ed.). Formatex Research Centre, 2013.
- Fytli, D.; Zabaniotou, A.: “Utilization of sewage sludge in EU application of old and new methods: A review”. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Vol. 12 (2008), pág. 116-140.
- García-Sáinz, G.: “Estudio experimental de la co-gasificación de fangos de EDAR y carbón con aire en lecho fluidizado”. Directores: J. Ábrego, J. L. Sánchez. Tesis Doctoral (2013). Escuela de Ingeniería y Arquitectura. Universidad de Zaragoza.
- Gil-Lalaguna, N.: “Estudio de la gasificación de lodos de EDAR en lecho fluidizado: efecto de la atmósfera reactiva, evaluación energética y limpieza del gas producto”. Directores: J. L. Sánchez, M. B. Murillo. Tesis Doctoral (2015). Escuela de Ingeniería y Arquitectura. Universidad de Zaragoza.
- Gil-Lalaguna, N.; Sánchez, J. L.; Murillo, M. B.; Rodríguez, E.; Gea, G.: “Air-steam gasification of sewage sludge in a fluidized bed. Influence of some operating conditions”. *Chemical Engineering Journal*. Vol. 248 (2014), pág. 373-382.
- Gil-Lalaguna, N.; Sánchez, J. L.; Murillo, M. B.; Atienza-Martínez, M.; Gea, G.: “Energetic assessment of air-steam gasification of sewage sludge and of the integration of sewage sludge pyrolysis and air-steam gasification of char”. *Energy*. Vol. 76 (2014), pág. 652-662.
- Gómez-Barea, A.; Leckner, B.: “Modeling of biomass gasification in fluidized bed”. *Progress in Energy and Combustion Science*. Vol. 36 (2010), pág. 444-509.
- Houdková, L.; Boráň, J.; Ucekaj, V.; Elsäßer, T.; Stehlík, P.: “Thermal processing of sewage sludge - II”. *Applied Thermal Engineering*. Vol. 28 (2008), pág. 2083-2088.
- Inguanzo, M.: “Valorización energética y medioambiental de lodos de EDARs mediante pirólisis”. Directores: J. J. Pis, J. A. Menéndez. Tesis Doctoral (2004). Facultad de Química. Universidad de Oviedo.
- Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE): “Biomasa: Gasificación”. BESEL, S. A. (2007). ISBN-13: 978-84-96680-20-3.
- Jarunthammachote, S.; Dutta, A.: “Equilibrium modeling of gasification: Gibbs free energy minimization approach and its application to spouted bed and spout-fluid bed gasifiers”. *Energy Conversion and Management*. Vol. 46, (2008), pág. 1345-1356.
- Karmakar, M. K.; Datta, A. B.: “Generation of hydrogen rich gas through fluidized bed gasification of biomass”. *Bioresource Technology*. Vol. 102 (2011), pág. 1907-1913.

- Kaushal, P.; Abedi, J.; Mahinpey, N: "A comprehensive mathematical model for biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor". *Fuel*. Vol. 89 (2010), pág. 3650-3661.
- Li, X.T.; Grace, J. R.; Watkinson, A.P.; Lim, C. J.; Ergüdenler, A.: "Equilibrium modeling of gasification: a free energy minimization approach and its application to a circulating fluidized bed coal gasifier". *Fuel*. Vol. 80 (2001), pág. 195-207.
- Li, X.T.; Grace, J. R.; Lim, C. J.; Watkinson, A.P.; Chen, H.P.; Kim, J. R.: "Biomass gasification in a circulating fluidized bed". *Biomass and Bioenergy*. Vol. 26 (2004), pág. 171-193.
- Loha, C.; Chatterjee, P. K.; Chattopadhyay, H.: "Performance of fluidized bed steam gasification of biomass: Modeling and experiment". *Energy Conversion and Management*. Vol. 52 (2011), pág. 1583-1588.
- Loha, C.; Chattopadhyay, H.; Chatterjee, P. K.: "Thermodynamic analysis of hydrogen rich synthetic gas generation from fluidized bed gasification of rice husk". *Energy*. Vol. 36 (2011), pág. 4063-4071.
- Manyà, J. J.; Sánchez, J. L.; Ábrego, J.; Gonzalo, A.; Arauzo, J: "Influence of gas residence time and air ratio on the air gasification of dried sewage sludge in a bubbling fluidised bed". *Fuel*. Vol. 85 (2006), pág. 2027-2033.
- McKendry, P.: "Energy production from biomass (part 1): overview of biomass". *Bioresource Technology*. Vol. 83 (2002), pág. 37-46.
- McKendry, P.: "Energy production from biomass (part 2): conversion technologies". *Bioresource Technology*. Vol. 83 (2002), pág. 47-54.
- McKendry, P.: "Energy production from biomass (part 3): gasification technologies". *Bioresource Technology*. Vol. 83 (2002), pág. 55-63.
- Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente (MAGRAMA): "Lodos de depuración de aguas residuales". *Calidad y Evaluación Ambiental. Prevención y Gestión de Residuos* (2015).
- Mitta, N. R.; Ferrer-Nadal, S.; Lazovic, A. M.; Perales, J. F.; Velo, E.; Puigjaner, L.: "Modelling and simulation of a tyre gasification plant for synthesis gas production". 16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering. *Computer Aided Chemical Engineering*. Vol. 21 (2006), pág. 1771-1776.
- Mora, X.: "Estudi i simulació amb ASPEN de la gasificació de fangs de depuradores". Director: F. J. Recasens. Proyecto Fin de Carrera (2012). Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona. Universitat Politècnica de Catalunya.
- Muazu, R. I.; Borrión, A. L.; Stegemann, J. A.: "Fluidised bed gasification of multiple agricultural biomass derived briquettes". *World Academy of Science, Engineering and Technology. International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering*. Vol. 9, No. 5 (2015), pág. 610-616.

- Ngo, S. I.; Nguyen, T. D. B.; Lim, Y.-I.; Song, B.-H.; Lee, U.-D.; Choi, Y.-T.; Song, J.-H.: "Performance evaluation for dual circulating fluidized-bed steam gasifier of biomass using quasi-equilibrium three-stage gasification model". *Applied Energy*. Vol. 88 (2011), pág. 5208-5220.
- Nikoo, M. B.; Mahinpey, N.: "Simulation of biomass gasification in fluidized bed reactor using Aspen Plus". *Biomass and Bioenergy*. Vol. 32 (2008), pág. 1245-1254.
- Nilsson, S.: "Modelado y simulación de un proceso de gasificación en tres etapas para residuos y biomásas". Director: A. Gómez-Barea. Tesis Doctoral (2012). Escuela Técnica Superior de Ingenieros. Universidad de Sevilla.
- Nilsson, S.; Gómez-Barea, A.; Fuentes-Cano, D.; Ollero, P.: "Gasification of biomass and waste in a staged fluidized bed gasifier: Modeling and comparison with one-stage units". *Fuel*. Vol. 97 (2012), pág. 730-740.
- Nilsson, S.; Gómez-Barea, A.; Ollero, P.: "Gasification of char from dried sewage sludge in fluidized bed: Reaction rate in mixtures of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O". *Fuel*. Vol. 105 (2013), pág. 764-768.
- Petersen, I.; Werther, J.: "Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed". *Chemical Engineering and Processing*. Vol. 44 (2005), pág. 717-736.
- Pliego-Bravo, Y. S.; García-Reyes, M. E.; Urrea-García, G. R.; Vergara-Hernández, M.: "Simulación del proceso termoquímico sugerido para el aprovechamiento de los lodos residuales como fuente de energía alterna". *Revista Mexicana de Ingeniería Química*. Vol. 13, No. 2 (2014), pág. 619-629.
- Porrazzo, R.; White, G.; Ocone, R.: "Aspen Plus simulations of fluidised beds for chemical looping combustion". *Fuel*. Vol. 136 (2014), pág. 46-56.
- Puig-Arnau, M.; Bruno, J. C.; Coronas, A.: "Review and analysis of biomass gasification models". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Vol. 14 (2010), pág. 2841-2851.
- Rajendran, K.; Kankanala, H. R.; Lundin, M.; Taherzadeh, M. J.: "A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus". *Bioresource Technology*. Vol. 168 (2014), pág. 7-13.
- Ramzan, N.; Ashraf, A.; Naveed, S.; Malik, A.: "Simulation of hybrid biomass gasification using Aspen Plus: A comparative performance analysis for food, municipal solid and poultry waste". *Biomass and Bioenergy*. Vol. 35 (2011), pág. 3962-3969.
- Roche, E.: "Optimización de la gasificación de lodos de estaciones depuradoras de aguas residuales urbanas para minimizar la formación de alquitranes". Directores: M. E. Rodríguez, A. Narros. Tesis Doctoral (2014). Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid.
- Roche, E.; De Andrés, J. M.; Narros, A.; Rodríguez, M. E.: "Energía renovable a partir de los lodos de depuradoras urbanas". 11º Congreso Nacional del Medio Ambiente (CONAMA 2012).

- Roche, E.; De Andrés, J. M.; Narros, A.; Rodríguez, M. E.: "Air and air-steam gasification of sewage sludge. The influence of dolomite and throughput in tar production and composition". *Fuel*. Vol. 115 (2014), pág. 54-61.
- Schuster, G.; Löffler, G.; Weigl, K.; Hofbauer, H.: "Biomass steam gasification: an extensive parametric modeling study". *Bioresource Technology*. Vol. 77 (2001), pág. 71-79.
- Shen, L.; Gao, Y.; Xiao, J.: "Simulation of hydrogen production from biomass gasification in interconnected fluidized beds". *Biomass and Bioenergy*. Vol. 32 (2008), pág. 120-127.
- Sotudeh-Gharebaagh, R.; Legros, R.; Chaouki, J.; Paris, J.: "Simulation of circulating fluidized bed reactors using Aspen Plus". *Fuel*. Vol. 77, No. 4 (1998), pág. 327-337.
- Stasta, P.; Boran, J.; Bebar, L.; Stehlik, P.; Oral, J.: "Thermal processing of sewage sludge". *Applied Thermal Engineering*. Vol. 26 (2006), pág. 1420-1426.
- Strezov, V.; Evans, T. J.: "Biomass Processing Technologies". CRC Press. Taylor and Francis Group, 2015. ISBN-13: 978-1-4665-6616-3.
- Tinaut, F. V.; Melgar, A.; Pérez, J. F.; Horrillo, A.: "Effect of biomass particle size and air superficial velocity on the gasification process in a downdraft fixed bed gasifier. An experimental and modelling study". *Fuel Processing Technology*. Vol. 89 (2008), pág. 1076-1089.
- Tchobanoglous, G.; Kreith, F.: "Handbook of solid waste management". Segunda Edición. Mc. Graw-Hill, 2002. ISBN-10: 0-07-135623-1.
- Waldheim, L.; Nilsson, T.: "Heating value of gases from biomass gasification". IEA Bioenergy Agreement, Task 20 - Thermal Gasification of Biomass. TPS Termiska Processer AB, 2001.
- Werther, J.; Ogada, T.: "Sewage sludge combustion". *Progress in Energy and Combustion Science*. Vol. 25 (1999), pág. 55-116.
- Zainal, Z. A.; Ali, R.; Lean, C. H.; Seetharamu, K. N.: "Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials". *Energy Conversion and Management*. Vol. 42 (2001), pág. 1499-1515.